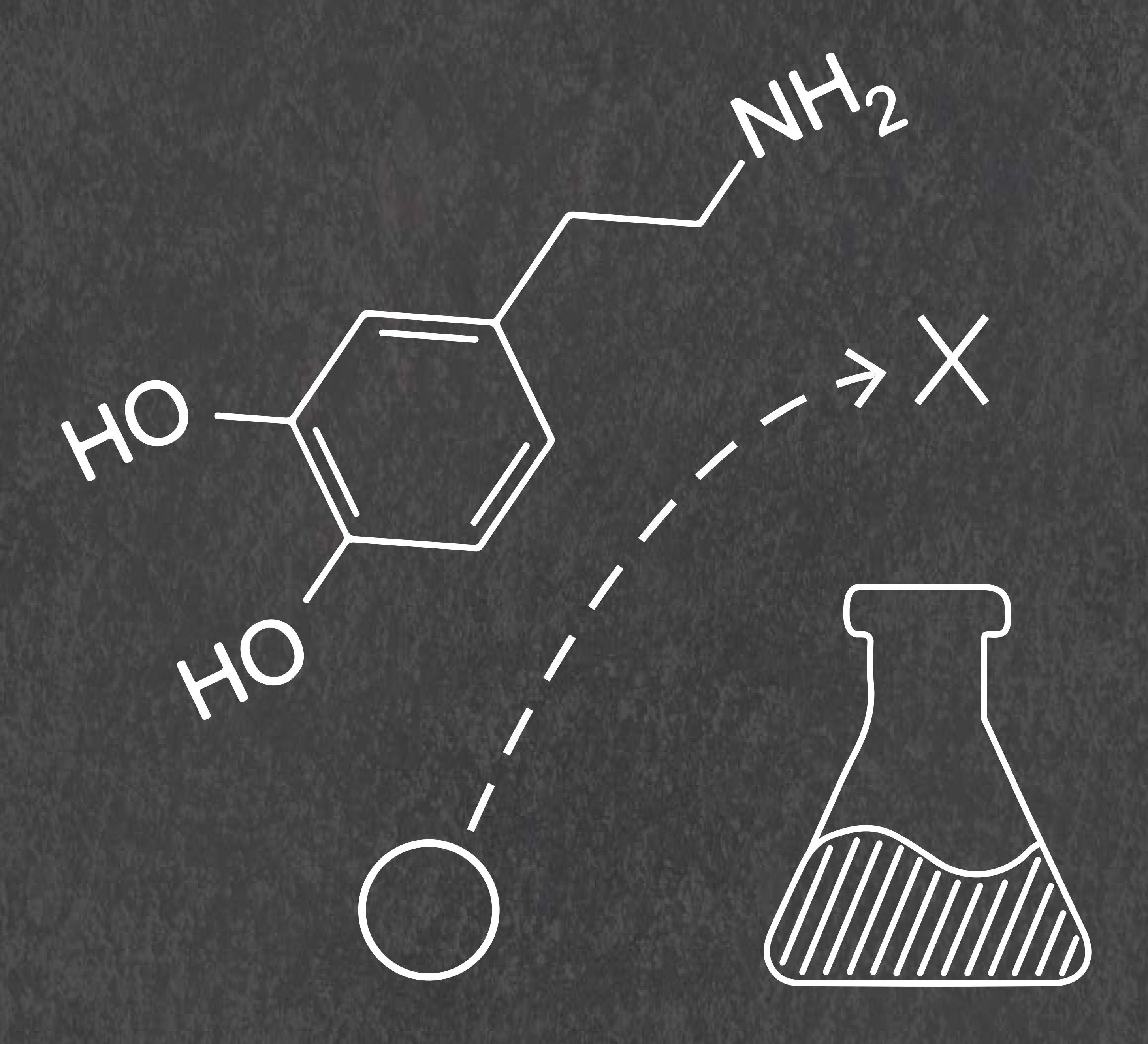


Introducción a la Filosofía de la Química

Martín Labarca - Sebastian Fortin (Eds.)

En la filosofía contemporánea de las ciencias, una de las subdisciplinas de mayor crecimiento en las últimas décadas ha sido la filosofía de la química, cuyo origen se remonta a mediados de la década de 1990. El gran interés que ha despertado la disciplina en América Latina ha sido muy significativo para el campo.

Este libro pretende llenar un vacío en el ámbito latinoamericano, colocando en primer plano las perspectivas que emergen de diferentes enfoques disciplinarios. El volumen incluye colaboraciones de investigadores de Chile, Brasil y Argentina. Los trece capítulos se proponen reflejar el estado del arte de cada uno de los tópicos tratados, mostrando aspectos de la ciencia química desde diferentes perspectivas de análisis. El propósito general es introducir a educadores y estudiantes de química, así también como a químicos, historiadores y filósofos de la ciencia en los debates actuales más relevantes en el ámbito de la filosofía contemporánea de la química.



Introducción a la Filosofía de la Química / Labarca, Martín; Fortin, Sebastian (Editores). 1º edición, Sociedad Chilena de Didáctica, Historia y Filosofía de la Ciencias Bella Terra Ltda., Santiago de Chile, Chile, 2023.

1. Filosofía de la química. 2. Historia de la química. 3. Fundamentos de la química.

Editores

Martín Labarca
CONICET y Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires, Argentina.

Sebastian Fortin
CONICET y Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires, Argentina.

Autores

Ronei Mocellin, Universidade Federal do Paraná, Brasil.

Luciana Zaterka, Universidade Federal do ABC, Brasil.

Alfio Zambon, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina.

Fiorela Alassia, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Argentina.

Cristian López, Universidad de Buenos Aires, Argentina y Universidad de Lausanne, Suiza.

María José Ferreira Ruiz, Universität Bielefeld, Alemania.

Hernán Accorinti, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Mario Quintanilla-Gatica, Universidad Católica de Chile, Chile.

Mariana Córdoba, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Martín Labarca, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Sebastian Fortin, CONICET y Universidad de Buenos Aires, Argentina.

Título: Introducción a la Filosofía de la Química
Editores: Labarca, Martín; Fortin, Sebastian
Editorial: Sociedad Chilena de Didáctica, Historia y Filosofía de la Ciencias Bella Terra Ltda.
Lugar: Santiago de Chile, Chile
Año: 2023
Número de inscripción 2023-A-12437
ISBN 978-956-416-697-1

Diseño editorial: Martín Labarca y Sebastian Fortin
Diseño de portada: Nicolás Martínez - Maximiliano Martínez - Martín Labarca
Coordinación editorial: Martín Labarca y Sebastian Fortin

Las opiniones expuestas en los trabajos publicados en esta colección son de la exclusiva responsabilidad de sus autores.

INTRODUCCIÓN A LA FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA

MARTÍN LABARCA – SEBASTIAN FORTIN (Eds.)

PRÓLOGO

La filosofía de la química como disciplina comenzó a desarrollarse a mediados de la década de 1990. Hasta entonces, algunos autores aislados habían publicado trabajos filosóficos sobre el tema, mientras que el campo seguía siendo pre-paradigmático, por tomar una frase de Thomas Kuhn.[1] A mediados de los años noventa, varios autores que habían trabajado en relativo aislamiento se dieron a conocer y empezamos a celebrar reuniones internacionales.[2]

Una de las primeras reuniones de este tipo se celebró en la pequeña ciudad del norte de Inglaterra, Ilkley. Ese encuentro condujo rápidamente a la creación de una sociedad internacional que ha seguido reuniéndose anualmente desde entonces.[3] La 26ª y más reciente reunión se celebró vía Zoom en agosto de 2022. El otro ingrediente clave para la disciplina ha sido la creación de una revista revisada por pares, que tuve el placer de fundar en 1999.[4]

Un profundo interés por la filosofía de la química en América Latina ha sido muy significativo para el campo. Comenzó cuando Olimpia Lombardi y su entonces estudiante de doctorado Martín Labarca publicaron un artículo sobre la reducción ontológica de la química.[5] Desde entonces, muchos de los 'hijos' académicos de Olimpia, e incluso sus 'nietos', han pasado a publicar artículos en el campo y a ocupar puestos académicos, y muchos de ellos están representados en la presente colección de artículos.

La razón del crecimiento desproporcionado del campo en América Latina sigue siendo un misterio, al menos para mí.[6] Según algunos, puede deberse al hecho de que los estudiantes de secundaria tienen algún contacto con la filosofía, lo que no sucede en el Reino Unido y en Estados Unidos. Otro posible factor radica en que la reflexión filosófica es más natural en los países predominantemente católicos. Mientras tanto, los países del norte de Europa y Estados Unidos dan menos valor a la filosofía y más a la práctica de la ciencia, tal vez en consonancia con la ética laboral protestante. Sin duda, puede haber otras razones, pero el hecho es que la filosofía de la química parece haber arraigado más en América Latina, al igual que los aspectos educativos de esta disciplina.

Por ejemplo, la tercera reunión de las *Jornadas de Fundamentos de Química* contó con 319 participantes de 15 países latinoamericanos. Junto con las *Jornadas de Historia, Filosofía y Didáctica de la Química del Cono Sur* se han establecido como reuniones permanentes.

El presente volumen hace gala de este interés y experiencia en abundancia. En los 13 capítulos que siguen, se discuten con conocimiento de causa muchos de los temas contemporáneos de la filosofía de la química. Estos temas incluyen la cuestión de la estructura molecular y su relación con la mecánica cuántica, la naturaleza de los elementos, la tabla periódica, el reduccionismo, los orbitales atómicos, el esencialismo, las leyes químicas, la química supramolecular, la educación química e incluso la filosofía feminista de la química. También debo mencionar un excelente capítulo inicial de dos filósofos de la ciencia brasileños, Mocellin y Zaterka, que creo han abierto un nuevo camino al describir los antiguos orígenes de la filosofía de la química.

Por último, aplaudo a mis buenos amigos Sebastian Fortin y Martín Labarca por la edición de esta valiosa obra que se suma a la creciente literatura sobre filosofía de la química.

Eric Scerri

University of California Los Angeles

Noviembre 2022

Notas

[1] H. Primas, *Chemistry, Quantum Mechanics And Reductionism: Perspectives In Theoretical Chemistry* / Edition 2, Springer, Berlin, 1983.

J. Van Brakel, "Chemistry", in *Handbook of Metaphysics and Ontology*, Vol. I. Philosophia Verlag, München, pp. 146–147, 1991.

[2] E. Scerri, "Are Chemistry and Philosophy Miscible?", *Chemical Intelligencer*, 3, 44–46, 1997; E. Scerri, "Philosophy of Chemistry – A New Interdisciplinary Field?", *Journal of Chemical Education* 77, 522–526, 2000; E. Scerri, "La Filosofía de la Química, La Sección Más Reciente de la Filosofía de la Ciencia", *Anuario Latino Americano de Quimica*, XI, 187–191, 1998–99.

[3] La Website de la ISPC (International Society for the Philosophy of Chemistry) es: https://sites.google.com/site/socphilchem/

[4] *Foundations of Chemistry*, https://www.springer.com/journal/10698

[5] O. Lombardi; M. Labarca, "The Ontological Autonomy of the Chemical World", *Foundations of Chemistry*, 7, 125–148, 2005.

[6] He observado esta tendencia a través del dictado de conferencias en Argentina, Brasil, Chile, Colombia, México y Uruguay.

INTRODUCCIÓN

La compleja actividad humana denominada 'ciencia' (entendida como *actividad* o *proceso* o como *resultado* o *producto*) goza de un alto prestigio en nuestra sociedad. Algunos de esos resultados son difundidos a través de los medios masivos de comunicación. Pero, aunque no tan difundidas, existen también otras perspectivas de reflexión que tienen a la ciencia, precisamente, como objeto de estudio y que constituyen los llamados *estudios sobre la ciencia* o *estudios metacientíficos*. Tales estudios están conformados por la *historia de la ciencia*, la *filosofía de la ciencia* (habitualmente denominada epistemología aunque, valga aclarar, este término es ambiguo), la *sociología de la ciencia* y la *psicología de la ciencia*. El aporte de cada uno de estos estudios da lugar a diferentes aspectos de la actividad científica, objeto de reflexión metateórica. En particular, el presente libro se ocupa de uno de ellos, el filosófico.

En la filosofía contemporánea de las ciencias, una de las subdisciplinas de mayor crecimiento en las últimas décadas ha sido, precisamente, la filosofía de la química. Su origen y su amplia difusión en América Latina fueron descriptos en el Prólogo por Eric Scerri. Este libro pretende entonces llenar un vacío en el ámbito latinoamericano, colocando en primer plano las perspectivas que emergen de diferentes enfoques disciplinarios. El volumen incluye colaboraciones de investigadores de Chile, Brasil y Argentina. Los trece capítulos muestran aspectos de la ciencia química desde diferentes perspectivas de análisis, y se proponen reflejar el estado del arte de cada uno de los tópicos tratados. El propósito general es introducir a educadores y estudiantes de química, así también como a químicos, historiadores y filósofos de la ciencia en los debates actuales más relevantes en el ámbito de la filosofía contemporánea de la química.

En el capítulo que abre este volumen "Una breve introducción a la filosofía de la química", Ronei Mocellin y Luciana Zaterka presentan una breve descripción de la institucionalización de la investigación en filosofía de la química, destacando su origen a partir de dos factores principales: la enseñanza de la ciencia química y el uso del conocimiento químico y su historia en argumentos relacionados con la filosofía de la ciencia en general. Los autores estructuran la historia entre química y filosofía a partir de tres ejes de investigación. El primero de ellos aborda un problema ontológico que concierne con la cuestión de la identidad de la química. El segundo eje se ocupa de cuestiones epistemológicas y metodológicas: ¿Cómo conocer estas entidades químicas?

¿Cómo nombrarlas y clasificarlas? ¿Cuáles son sus principales métodos teóricos e instrumentales? ¿Cómo enseñar este conocimiento? Y en el tercer eje abordan algunas cuestiones antropológicas: ¿Cuáles son las relaciones entre la química y la sociedad? ¿Entre lo natural y lo artificial? ¿Entre lo inerte y lo vivo?

En el siguiente trabajo histórico, Alfio Zambon y Fiorela Alassia abordan las principales reflexiones filosóficas en torno al concepto de 'elemento químico', desde los presocráticos hasta las discusiones actuales. Se exponen algunos de los desarrollos de pensadores tan disimiles y temporalmente distantes como Tales de Mileto, Empédocles, Aristóteles, Gassendi, Boyle, Lavoisier, Mendeleev y Paneth, entre otros, acerca de una categoría relevante tanto en la ciencia química como en la filosofía contemporánea de la química.

En "Problemas en la Tabla Periódica de los Elementos", Martín Labarca presenta los principales problemas y sus líneas argumentativas que se debaten en torno a uno de los principales íconos de la ciencia contemporánea. ¿Hay una forma óptima de presentar los elementos en el sistema periódico? ¿Puede la tabla periódica ser reducida a la mecánica cuántica? ¿Cuáles son las posiciones adecuadas para el hidrógeno y el helio? ¿Qué elementos deben formar parte del grupo 3? ¿Cuál es el papel de las tríadas de número atómico? ¿Cuál es el estatus de la ley periódica?

En el siguiente capítulo, Cristian López en "Reduccionismos en filosofía de las ciencias y sus problemas" muestra la complejidad del concepto de reducción tal como es entendido en la filosofía de las ciencias contemporánea; en este sentido, el autor traza un mapa general que permite al lector orientarse a través de los diferentes conceptos de reducción, sus clasificaciones y sus relaciones. Asimismo, el capítulo muestra en qué medida existe un problema con el proyecto reduccionista a la luz de algunas críticas que han surgido en las últimas décadas.

Los dos capítulos siguientes están dedicados a las relaciones entre química y física. En el primero de ellos, Martín Labarca aborda el estatus ontológico de los orbitales atómicos. En septiembre de 1999 se anunciaba que los orbitales *d* de la cuprita (Cu_2O) habían sido observados y fotografiados por primera vez. El artículo generó un profundo impacto en las comunidades física y química. A partir de allí, se desencadenó un acalorado debate respecto de la naturaleza de los orbitales atómicos. ¿Son entidades existentes en el mundo o, por el contrario, son sólo meras ficciones matemáticas? El propósito de este capítulo es mostrar la complejidad del problema, dada las distintas

interpretaciones del concepto de 'orbital' en química y en física. Sobre esta base, se exponen las principales interpretaciones respecto de este tópico.

El concepto clásico de 'estructura molecular' es central para el pensamiento químico moderno. Sin embargo, parece no encontrar lugar en la ontología descrita por la mecánica cuántica, ya que apela a nociones clásicas como la posición de los núcleos atómicos o la individualidad de los electrones, ambas ideas fuertemente desafiadas en el contexto cuántico. En el capítulo dedicado al tema, Sebastian Fortin expone y analiza la contradicción fundamental que implica aceptar la estructura molecular y los axiomas de la mecánica cuántica al mismo tiempo, presentando las principales posiciones filosóficas sobre el problema.

La idea de 'clase natural' hace referencia a una clasificación o agrupamiento de ítems con determinadas características que los tornan científicamente relevantes. En el capítulo dedicado a la temática, "Clases naturales en química: esencialismo y antiesencialismo microestructural", María Ferreira Ruiz comienza introduciendo la idea de clase natural de forma intuitiva, precisando qué se entiende por 'clase' y qué se entiende por 'natural'. La autora trata la cuestión epistémica, semántica y metafísica de las clases naturales, y se presenta el contraste entre las dos posiciones filosóficas más generales respecto de las clases: realismo y convencionalismo. Asimismo, se problematizan las cuestiones de las clases naturales, muy estrechamente vinculadas al denominado 'esencialismo microestructuralista'.

En "Modelos en química: el problema de la electronegatividad", Hernán Accorinti y Martín Labarca muestran que junto con la muy amplia variedad de modelos de electronegatividad coexistentes hay una incomprensión respecto de lo que la noción misma de electronegatividad implica. Los autores analizan tres modelos clásicos (Pauling, Mulliken y Allred-Rochow), mostrando las diferencias conceptuales existentes entre ellos, así como la problemática vinculada al carácter representativo de modelos empíricamente exitosos pero incompatibles entre sí.

A continuación, Hernán Accorinti aborda un problema recurrente en el ámbito de la filosofía general de la ciencia pero que cobra singular relevancia en el contexto de la química: el problema en torno a las leyes científicas. El principal inconveniente es que las leyes de la química no son universales; es más, en la práctica ellas son enunciadas junto con un sinnúmero de excepciones. Dado que hay excepciones podríamos afirmar

que aquello que aseveran las leyes no es ni universalmente verdadero ni necesario. Pero si es así, ¿son auténticas leyes científicas? y de serlo, ¿cuál es la razón de tal legalidad?

Alfio Zambon y Fiorela Alassia en “Nanoquímica y química supramolecular: algunas consideraciones filosóficas” presentan una breve caracterización de los compuestos nanoquímicos y supramoleculares, repasando el tipo de interacciones químicas involucradas, los fenómenos y compuestos supramoleculares, las metodologías de obtención de nanopartículas y un breve repaso del advenimiento de ambos campos disciplinares. Seguidamente, los autores recorren los diferentes abordajes filosóficos, por ejemplo, la discusión acerca del estatus ontológico de las entidades nanoquímicas, el papel de la emergencia inter e intranivel, la influencia de valores estéticos, así como algunos aspectos éticos.

Los siguientes dos capítulos están a cargo de Mario Quintanilla-Gatica. En el primero de ellos, “Historia de la química, filosofía de la química y didáctica de la química. Una triada virtuosa”, el autor expone desde su mirada los nexos entre historia de la ciencia, filosofía de la ciencia y didáctica de las ciencias con la finalidad de explicitar la naturaleza metacientífica de dichos campos disciplinares y del valor de su vinculación para la comunidad científica en general y la formación del profesorado. En este sentido, hace referencia a algunas de las corrientes filosóficas que ayudarán a comprender estas relaciones y sus consecuencias para la enseñanza, la evaluación y el aprendizaje de la química. Los nexos entre dichas disciplinas son caracterizados utilizando como ejemplo la emergencia de la teoría atómica de John Dalton. Quintanilla-Gatica concluye su trabajo reflexionando acerca de las tensiones paradigmáticas entre las visiones absolutistas y constuctivistas de la ciencia.

Y en el capítulo “Racionalismo categórico y racionalismo moderado. Perspectivas, contradicciones y propuestas para la formación del profesorado y la enseñanza de la química”, Quintanilla-Gatica analiza las tensiones teóricas entre racionalismo y empirismo comentando algunas polémicas para la enseñanza de la química. Se exponen las principales ideas del constructivismo irracional, se desarrollan y profundizan los postulados del racionalismo hipotético que derivan en el constructivismo moderado y sus contribuciones a la enseñanza de la química. El autor comparte algunas propuestas útiles y necesarias para vincular la historia de la química, la filosofía de la química y la didáctica de la química como una tríada virtuosa en la formación del profesorado, la enseñanza y el aprendizaje de la química.

En el capítulo que cierra este volumen, Mariana Córdoba plantea la pregunta: ¿Es posible una filosofía feminista de la química? Para responderla, la autora comienza elucidando en qué se diferencian las filosofías feministas especiales de la ciencia de una filosofía feminista general de la ciencia. Expone algunos aportes en el análisis filosófico de la química desde una perspectiva de género, donde se encuentran trabajos sobre aspectos prácticos de la disciplina, sobre el sexismo predominante en la educación en química y en la historia de la disciplina, siendo más escasos aquellos que evalúan el sesgo de género en el contenido de las teorías químicas. A partir de estos análisis, Córdoba formula algunas preguntas para pensar la posibilidad de una filosofía de la química con perspectiva de género.

Nuestro agradecimiento final a los autores por su fino trabajo y por el permanente diálogo filosófico, siempre inspirador y productivo.

Martín Labarca y Sebastian Fortin
CONICET – Universidad de Buenos Aires

ÍNDICE

PRÓLOGO ………………………………………………………………………… v

INTRODUCCIÓN ……………………………………………………………….. vii

ÍNDICE ………………………………………………………………………... xii

1. Una breve introducción a la Filosofía de la Química …………..……………. 1
Ronei Mocellin y Luciana Zaterka

2. La concepción de ‘elemento químico’: desde la antigüedad a las discusiones actuales ………………………………………………………………………... 34
Alfio Zambon y Fiorela Alassia

3. Problemas en la tabla periódica de los elementos …………………………….. 53
Martín Labarca

4. Reduccionismos en filosofía de las ciencias y sus problemas ………………… 70
Cristian López

5. Relaciones entre química y física I: El problema de la naturaleza de los orbitales ……………………………………………………………………….. 91
Martín Labarca

6. Relaciones entre química y física II: El problema de la estructura molecular ... 106
Sebastian Fortin

7. Clases naturales en química: esencialismo y antiesencialismo microestructural 125
María José Ferreira Ruiz

8. Modelos en química: el problema de la electronegatividad …………………... 142
Hernán Accorinti y Martín Labarca

9. El problema de las leyes químicas …………………………………………….. 159
Hernán Accorinti

10. Nanoquímica y química supramolecular: algunas consideraciones filosóficas 177
Alfio Zambon y Fiorela Alassia

11. Historia de la química, filosofía de la química y didáctica de la química. Una triada virtuosa ………………………………………………………………. 197
Mario Quintanilla-Gatica

12. Racionalismo categórico y racionalismo moderado. Perspectivas, contradicciones y propuestas para la formación del profesorado y la enseñanza de la química ………………………………………………………………….... 212
Mario Quintanilla-Gatica

13. ¿Es posible una filosofía feminista de la química? …………………………... 229
Mariana Córdoba

CAPÍTULO 1

Una breve introducción a la filosofía de la química

Ronei Clécio Mocellin
Universidade Federal do Paraná

Luciana Zaterka
Universidade Federal do ABC

En las últimas décadas del siglo XX surgieron dos nuevas áreas de investigación académica con el conocimiento químico como base de sus reflexiones: la investigación sobre la enseñanza y la filosofía de la química. Estas investigaciones han puesto de manifiesto que el conocimiento de la 'filosofía de los filósofos' y de la 'química de los químicos' no es suficiente para enseñar química ni para comprender las características ontológicas, epistemológicas o metodológicas de esta ciencia. Sin embargo, la casi ausencia de la química en las reflexiones del ámbito filosófico es inquietante, ya que sus productos, para bien o para mal, están omnipresentes en la vida de todos. De hecho, los debates filosóficos sobre el desarrollo del conocimiento científico que tuvieron lugar en la primera mitad del siglo XX se basaron, sobre todo, en ejemplos extraídos de las ciencias físicas, de manera que la expresión 'filosofía de la ciencia' se convirtió en sinónimo de 'filosofía de la física'.

Como la física siempre fue considerada por los filósofos como la ciencia experimental mejor asimilada por el lenguaje matemático, se tomó como modelo de lo que sería el conocimiento científico para las demás ciencias empíricas. Al fin y al cabo, el modelo físico-matemático habría sido el dominante desde la revolución científica del siglo XVII. Una demostración de esta selectividad epistemológica la ofrecen las principales publicaciones que se han ocupado de la filosofía de la ciencia en los países occidentales. Por ejemplo, si consultamos las páginas de *The Journal of Unified Science*, portavoz de la Escuela de Viena entre 1931 y 1940, no encontraremos ninguna referencia a la química, y lo mismo ocurre con los títulos de las contribuciones al *Congreso Internacional para la Unidad de la Ciencia*. Del mismo modo, en los 18 volúmenes de *Foundations of the Unity of Science: Toward an International Encyclopedia of Unified Science*, publicados entre 1938 y 1970, hay numerosos artículos sobre física,

matemáticas, biología y probabilidad; sin embargo, sólo uno se refiere a la química (Brakel, 2000, p.17).

La posición expresada por el físico británico Paul Dirac (1902-1984), según el cual las leyes de la química podían ser explicadas por la mecánica cuántica, no tuvo mucha repercusión entre los químicos, pero contribuyó a que los filósofos de la ciencia consideraran la química como ontológica y epistemológicamente reducible a la física (Dirac, 1929). Así, los modelos epistemológicos hegemónicos, especialmente en lengua inglesa, privilegiaron los análisis lógico-matemáticos y lingüísticos de la ciencia. Pero una ciencia con una larga historia, cuya comunidad de investigación actual es la que más artículos y libros científicos produce, cuyos productos son inseparables del modo de vida de las sociedades industriales, que fabrica cada año miles de nuevas moléculas [nuevos objetos materiales (técnicos) que tendrán implicaciones medioambientales, económicas, farmacológicas, tecnológicas, éticas, estéticas...], ¿no produce preguntas filosóficas propias? (Schummer, 2006).

Sin embargo, es interesante observar que la casi ausencia de reflexiones filosóficas relacionadas con el conocimiento químico en las publicaciones en lengua inglesa de la primera mitad del siglo XX, no se repitió ni en Francia ni en los países de Europa del Este. El interés por la filosofía de la química en los países socialistas surgió principalmente del uso de la química como ejemplo en la demostración de Friedrich Engels (1820-1895) del carácter dialéctico del materialismo (Engels, 1976) en su *Dialéctica de la Naturaleza*. Pero también de la centralidad de la química en la filosofía hegeliana de la ciencia, ya que Hegel consideraba que la química se encontraba entre el mecanicismo y la teleología, apoyando así el desarrollo de una 'perspectiva teórica' autónoma para esta ciencia. Así, habría tres tipos de movimientos materiales: el mecánico, el orgánico y el químico (Renault, 2002).

En defensa de la interpretación dialéctico-materialista de la ciencia, muchos filósofos y químicos de Europa del Este, especialmente rusos y alemanes orientales, escribieron sobre la particularidad de las ciencias, refutando la interpretación neoempirista del grupo vienés, así como su reduccionismo lingüístico-físico. La aplicación del esquema conceptual del materialismo dialéctico a las ciencias naturales sugirió una serie de cuestiones directamente relevantes para el surgimiento de una filosofía de la química. Una de ellas era la distinción de diferentes tipos de cambio material, así como la de diferentes tipos de materia que, al no ser reducibles a las teorías

físicas, carecían por tanto de leyes propias que las describieran, asegurando una singularidad disciplinar. El principal ejemplo fue la ley periódica de Dmitri Mendeleev (1834-1907) que dio lugar a la organización de la periodicidad de ciertas propiedades químico-físicas de los elementos químicos en una tabla sintética (Bensaude-Vincent, 1996; Scerri, 2007; 2009). Para dimensionar estos intereses intelectuales, hubo numerosas publicaciones de filosofía de la química en revistas especializadas, como la rusa *Voprosi Filosofii* (Problemas de la Filosofía). También se publicaron varios libros que trataban exclusivamente sobre cuestiones filosóficas sugeridas por el estudio de la disciplina, por ejemplo, la estructura atómica de la materia, la química cuántica, las teorías ácido-base, la estructura de las moléculas orgánicas, etc. (Brakel, 2000, pp.22-34; Schummer, 2011, p.42).

Francia también tenía sus particularidades. La filosofía francesa de la ciencia es heredera de la tradición enciclopédica, en la que el problema de la definición y la clasificación de un conocimiento siempre se han considerado inseparables de su historia. Es decir, a diferencia de la tradición anglosajona, filósofos como A. Comte (1798-1857), P. Duhem (1861-1916), E. Meyerson (1859-1933), G. Bachelard (1884-1962) y Hélène Metzger (1889-1944) sostuvieron que los análisis filosóficos sobre el desarrollo de las ideas científicas no podían desvincularse del contexto histórico en el que se desenvolvían, aunque llegaron a conclusiones filosóficas muy diferentes. Otra característica de las reflexiones de los autores franceses fue considerar que cada campo de la investigación científica tiene una identidad epistémica, es decir, que hay una *philosophie des sciences* y no una *filosofía de la ciencia*. La investigación sobre las teorías de la materia también tuvo un lugar privilegiado, y fue en la química, que se ocupaba específicamente de las transformaciones materiales, donde se encontraron los mejores casos histórico-epistemológicos. Uno de estos casos, por ejemplo, fue el largo debate sobre la existencia de los átomos en el siglo XIX, que generó un enfrentamiento conceptual entre atomistas y energetistas, positivistas y antipositivistas, realistas y antirrealistas, y que duró hasta principios del siglo XX (Bensaude-Vincent, 2005, 2009).

Sin embargo, la consolidación disciplinaria y la organización institucional de la filosofía de la química se iniciaron efectivamente en la década de 1990. En 1994 se celebró en Londres la *First International Conference on Philosophy of Chemistry*, además de varias reuniones y congresos celebrados en Alemania, Italia y Estados Unidos. En 1995 se fundó la revista *Hyle: International Journal for Philosophy of Chemistry*, cuyo

editor jefe es desde entonces Joachim Schummer. En 1997 se organizó la *International Society for the Philosophy of Chemistry* (ISPC). En 2021, en Buenos Aires, se celebró la vigésimo cuarta edición del ISPC, lo que apunta a una sólida consolidación de la filosofía de la química como dominio de la investigación académica. En 1999 se creó en Estados Unidos la revista *Foundations of Chemistry*, cuyo redactor jefe es Eric Scerri. Desde entonces, un número creciente de universidades han ofrecido cátedras de filosofía de la química en cursos de filosofía y química, así como maestrías y doctorados específicos en el área (Baird, Scerri y McIntyre, 2006; Scerri y Fischer, 2016; Bensaude-Vincent y Eastes, 2020).

La investigación sobre la enseñanza de la química ha contribuido a la institucionalización de la filosofía de la química en los departamentos de química y educación. Una de las cuestiones que ha exigido un análisis filosófico detallado por parte de los educadores consiste en comprender los procedimientos adecuados en la construcción de modelos explicativos en química. ¿Cómo deben aprender los alumnos los conceptos químicos? ¿Qué estrategias hay que adoptar en el aprendizaje del lenguaje de la química, un nuevo lenguaje que rompe y a la vez queda superpuesto en otros niveles lingüísticos (cotidiano, informal, mediático...)? ¿Cuál es el perfil del profesional que tiene la tarea de promover esta "apropiación científica", esencial para la *educación ciudadana*? Hay consenso en que la realización de experimentos es indispensable para comprender los conceptos químicos, pero ¿cómo organizarlos? ¿Cómo se puede vincular de forma *significativa* este ir y venir entre la teoría y la práctica que caracteriza a la ciencia de la química? ¿Cuáles son las *herramientas* pedagógicas más eficaces para esta tarea? En las últimas décadas se han realizado grandes esfuerzos para construir las bases epistémicas y metodológicas de la enseñanza de la química. Así, la centralidad de la ciencia química en las sociedades contemporáneas y la obligación republicana (*res publica*) de promover el dominio público de este conocimiento son razones más que suficientes para promover su enseñanza. Aunque los enfoques y las propuestas no son uniformes, el elemento común de estas investigaciones es el esfuerzo por promover el aprendizaje de la química, un proceso que pasa por el dominio de sus lenguajes y la capacidad del alumno (y del que enseña) de identificar 'problemas químicos' propios de sus contextos históricos y culturales y la capacidad de proponer soluciones (Erduran, 2001). Más que un reto para los profesionales del área, es una de las cuestiones clave en el proceso de construcción de las sociedades democráticas, siendo fundamental para esta tarea una reflexión filosófica

afinada (Neto, 2009; Gois, 2012; Labarca, Bejarano y Eicher, 2013; Ribeiro, 2014; Gois *et al.*, 2019).

Ciertamente, la enseñanza de la química es uno de los focos importantes de la investigación conceptual, pero los filósofos e historiadores han explorado otros ejes de investigación, ramificando así la institucionalización de la filosofía de la química en los departamentos de filosofía e historia de la ciencia. Además de las relaciones entre los filósofos canónicos y el pensamiento químico, las cuestiones relativas a la historia de la alquimia y la química, la historiografía, la epistemología, la ontología, la tecnología, la metodología, la mereología, la ética, la estética, la lógica, el lenguaje, la semiótica y la literatura señalan la existencia de una disciplina madura practicada por una comunidad de investigadores bien establecida.

Por último, la emergencia académica y disciplinar de la filosofía de la química en las últimas décadas ha ido acompañada de su globalización. En la actualidad, además de Europa, Estados Unidos y Canadá, la filosofía de la química es enseñada y su investigación es llevada a cabo por investigadores de América Latina, África y Asia. Esto es, sin duda, un indicio consistente de su implantación académica y de su madurez como ámbito específico de investigación. Aunque las reflexiones filosóficas, históricas o sociológicas sobre un determinado campo del conocimiento humano no pretenden 'mejorar' su imagen social, creemos que las aclaraciones que ofrecen las investigaciones en estos campos sirven al menos para proporcionar a la opinión pública elementos para una toma de decisiones mejor informada.

En este capítulo nuestro propósito es señalar algunos temas de investigación que creemos que forman parte de la disciplina académica que llamamos 'filosofía de la química'. Al igual que Joachim Schummer, consideramos que en la filosofía de la química hay temas que pertenecen a su periodo de 'infancia' disciplinar, y otros que forman parte de su 'madurez', en los que se abordan problemas filosóficos planteados exclusivamente por los objetos de la química. Los temas de la infancia, que abordan las aportaciones de los autores 'clásicos' de la disciplina, las relaciones entre la química y las demás ciencias, en particular el reduccionismo fisicalista, o incluso la presencia de la química en reconocidos filósofos, han contribuido a la estructuración del campo disciplinar. Pero una vez estructurados, los filósofos de la química han ampliado sus intereses para producir reflexiones centradas en los objetos químicos y sus implicaciones, ontológicas, epistemológicas, lógicas, metodológicas, éticas, estéticas, etc. Por tanto, la filosofía de la

química se encuentra en un momento de consolidación disciplinar, en el que tanto las cuestiones de 'infancia' como las de 'madurez' son investigadas por filósofos e historiadores de la química profesionales.

1. Alquimia, química y revolución científica

La expresión 'revolución científica' suele asociarse a los campos de la astronomía y la física-matemática, cuyos protagonistas fueron figuras ilustres como Copérnico, Galileo, Descartes y Newton. En los análisis estrictamente filosóficos de la revolución científica, la interpretación de Alexandre Koyré de que sí hubo una 'revolución científico-filosófica' fue ampliamente aceptada entre los filósofos. Esto puede parecer bastante razonable para el filósofo si se tiene en cuenta que la ciencia de nuestro tiempo y la del pasado es, como dijo Koyré, *"esencialmente theoria, la búsqueda de la verdad, y que, por lo tanto, tiene y tuvo siempre una vida propia, una historia inmanente"* (Koyré, 1982a, p.377). Para Koyré, la decisión filosófica de la ciencia moderna fue geometrizar la naturaleza a priori para someterla a la experimentación. Esto caracterizó, según Koyré, *"una de las más profundas, si no la más profunda revolución del pensamiento humano desde el descubrimiento del Cosmos por el pensamiento griego, una revolución que implica una 'mutación' intelectual radical de la que la ciencia física moderna es a la vez el fruto y la expresión"* (Koyré, 1982b, p.152).

Ahora bien, esta teorización del concepto de experimentación sostenida por Koyré excluye, por ejemplo, cualquier influencia en la revolución científica de uno de los heraldos del renacimiento del pensamiento químico-experimental, el médico y alquimista suizo Paracelso (1493-1541), aunque se le considere responsable de una gran renovación de la racionalidad alquímica en el período renacentista (Debus, 1965, 1996, 1997, 2002; Pagel, 1989; Webster, 2008). Ciertamente un genio, decía Koyré, pero que seguía creyendo en la correspondencia entre el *macro* y el *microcosmos* y en la transmutación de los metales (Koyré, 1997). Asimismo, Francis Bacon, otra figura esencial para comprender la importancia de la química en la constitución del pensamiento científico moderno, fue considerado por Koyré como de papel insignificante en la revolución científica moderna (Koyré, 1966, p.12).

Sin duda, el esclarecimiento de las investigaciones que implican la manipulación de materiales en la constitución de un *corpus* de química moderna nos remite a la historia de la alquimia, tanto en su aspecto *hermético* como en sus prácticas efectivas. No

obstante, conviene recordar que en el siglo XVII los términos 'alquimia' y 'química' se utilizaban indistintamente y denotaban un cuerpo de conocimientos estructurado racionalmente en torno a teorías y prácticas sobre la materia y sus transformaciones (Joly, 1992). La falta de claridad sobre el momento en que surgió una 'nueva' química sugiere que no fue mediante una ruptura drástica como se distinguieron estas dos tradiciones de investigación. La diferenciación entre estas racionalidades, la alquimia y la química, se hizo explícita gradualmente, a través de cambios en el tipo de lenguaje empleado (simbólico y escrito), en las conclusiones teóricas de los experimentos, en la propia noción de 'experiencia', en el ámbito secreto de sus prácticas y en una propuesta epistémica en la que existe una relación íntima entre el micro y el macrocosmos, entre el trabajo interior del adepto y su realización en el mundo. Sin embargo, las diferencias son mucho menores en relación con las prácticas, los instrumentos y los espacios utilizados en la investigación de las sustancias químicas, que siempre ha tenido lugar en un espacio epistémico fundamental: el laboratorio.

Pero, ¿qué es un experimento? ¿Qué hechos se producen a lo largo de su recorrido? ¿Cuál es la relación entre estos hechos y su horizonte de significaciones? ¿Cuál es el estatus ontológico y epistemológico de un experimento? Estas fueron algunas de las cuestiones implicadas en la famosa controversia entre Hobbes y Boyle sobre el valor cognitivo y ontológico de lo *experimental*, analizada por Steven Shapin y Simon Schaffer. Estos autores señalaron a Boyle como el creador del concepto moderno de experimentación, que consistía en la producción y observación de fenómenos en un laboratorio. Sin embargo, en lugar de ser un procedimiento que iba de las causas a los efectos (*a priori*), la experimentación consistía en un procedimiento *a posteriori*, es decir, en una operación efectiva sobre los efectos de los materiales, pero cuyos resultados eran siempre provisionales (Shapin y Schaffer, 1985). De hecho, otra importante polémica de la época tuvo lugar entre Boyle y Spinoza, precisamente sobre el lugar y la naturaleza de la razón y la experiencia en la construcción del conocimiento científico (Zaterka, 2004). Spinoza argumentó que Boyle no comprendía que la experiencia es incapaz de abarcar la totalidad de los fenómenos naturales y, por tanto, que siempre será parcial e incapaz de dar un diagnóstico preciso sobre las causas de los fenómenos. Ahora bien, lo que Espinosa no entendió es que Boyle, como químico, se preocupaba más por los efectos de los cuerpos manifiestos, que por sus respectivas causas.

Contemporáneo de Boyle, el médico-químico alemán Joachim Becher estableció una clara distinción entre lo esotérico y lo exotérico, entre un *methodus gnostica* y un *methodus didactica* en las prácticas de laboratorio. En obras como *Experimentum chymicum novum* (1671) y *Chymische Laboratium* (1680), Becher propuso un *metodus laborandi*, que consistía en la derivación de axiomas explicativos únicamente a partir de la observación y la experimentación. Además, Becher publicó textos en los que describía la construcción de un laboratorio, las características del espacio físico, los utensilios/instrumentos y las sustancias químicas necesarias para el trabajo. De hecho, la distinción que hace Becher entre la alquimia/química como ciencia moderna y la alquimia hermética no se basa en el tipo de experimentos realizados en el laboratorio, sino que resulta del método de interpretación de estos experimentos. Es decir, mientras que la alquimia hermética siguió cultivando una cultura del secreto, la alquimia/química moderna se convirtió en una ciencia pública, preocupada por justificar experimentalmente sus teorías sobre la materia y sus transformaciones (Hartung, 2008, pp.201-221).

Aunque es clara la ruptura explícita entre las aspiraciones metafísicas de la alquimia y la objetividad de la química moderna, podemos identificar ciertas continuidades que se manifiestan en ámbitos más específicos, como en algunos temas de investigación y en los conceptos empleados en su explicación racional. Por ejemplo, la polémica de principios del siglo XVIII entre los químicos *modernos* Louis Lemery (1677-1743), miembro de la Academia de Ciencias de París, y su colega Etienne-François Geoffroy (1672-1731) en torno al origen del hierro obtenido a partir de las cenizas de las plantas constituye un caso concreto de esta continuidad en la investigación en torno a las transmutaciones metálicas. Mientras Geoffroy retomaba los argumentos del alquimista Johann Becher (1635-1682), sosteniendo que la calcinación de una planta hacía que sus principios se combinaran para producir hierro de forma artificial, Lemery consideraba que la presencia del hierro tenía su origen en el suelo en el que crecía la planta y que entraba en su composición a través de la savia. Es decir, el tema central de la polémica fue la transmutación metálica y la producción artificial de un metal, todo ello en el seno de la Academia de Ciencias de París, considerada la guardiana de los procedimientos claros y distintos de la tradición cartesiana (Joly, 2007).

Lo más interesante de esta polémica no es exactamente el punto de divergencia entre los polemistas, sino lo que compartían ambos. En este caso, la creencia de que los metales eran cuerpos *compuestos*. Hay que recordar que hasta finales del siglo XVIII se

consideraba que los metales eran cuerpos *mixtos*, formados por dos o más *principios*, según la teoría de la materia que se considerara, por lo que era teóricamente posible creer que una reordenación de estos *principios* podía acelerar la transmutación de los metales ordinarios hacia lo que era su evolución natural, la de convertirse en un metal noble. Así, la controversia nos revela que incluso los químicos académicos, que rechazaban la cosmología que acompañaba a la antigua alquimia, consideraban la transmutación de los metales como un auténtico problema de investigación experimental y conjetura teórica. También señala la permanencia de un concepto operativo esencial tanto en la organización de los experimentos como en la explicación teórica de las supuestas transmutaciones. Es el concepto de *mezcla* o *mixto* (*mixis*) el que, aun presentando diferentes significados en la explicación de la composición metálica desde distintos principios, formó parte tanto del léxico alquímico como de la nomenclatura química hasta la ruptura conceptual operada por Lavoisier, quien sostuvo que los metales eran cuerpos simples y no compuestos (Bensaude-Vincent, 2008a).

Por último, los trabajos de A. Debus (1997), W. Newman (2006, 2019), B. Moran (2005), A. Clericuzio (1994, 2000), P. H. Smith (1994), B. Joly (1992, 2011), L. Zaterka (2004), L. Principe (2013), D. Kahn (2016) señala el equívoco de la tradición histórico-filosófica que toma la llamada revolución científica, ocurrida entre los siglos XVI y XVIII, como un fenómeno exclusivo de las ciencias físico-matemáticas, relegando a un segundo plano los estudios médicos y alquímicos. En otras palabras, la interpretación de la revolución científica y de sus consecuencias filosóficas es parcial si no se toma en serio la investigación de las operaciones químicas, de las controversias sobre la diferenciación entre lo natural y lo artificial, de la dimensión económica y social de los 'productos del arte', de la institucionalización de la enseñanza de la alquimia en las facultades de medicina de varias universidades europeas, así como de la literatura química especializada publicada desde principios del siglo XVII.

2. La química y algunos filósofos clásicos

Los historiadores de la química han deconstruido la supuesta falta de interés por la química de algunos filósofos básicos de la tradición filosófica occidental. A partir de estos estudios, sabemos que la química tuvo una gran relevancia en la elaboración conceptual de filósofos como Bacon, Locke, Descartes, Diderot, Rousseau, d'Holbach, Kant, Hegel o Schelling. Pero analicemos más detenidamente algunos de estos casos. Por ejemplo,

uno de los objetivos de la *filosofía experimental* propuesta por Francis Bacon (1561-1626) era superar la separación ontológica entre *arte* y *naturaleza*. No habría ninguna diferencia *esencial* entre los productos fabricados por el hombre y los presentes en el mundo natural. Ahora bien, éste era precisamente uno de los problemas más importantes a los que se enfrentaban los alquimistas medievales.

¿El artefacto producido por el alquimista era una imitación de un objeto material existente en la naturaleza, capaz, en el mejor de los casos, de engañar a los sentidos, o eran indistinguibles? ¿Era el 'arte alquímico' capaz de producir *sustancias* que no existían en el momento de la creación? ¿El oro artificial del alquimista era en realidad el mismo oro que se encuentra en la naturaleza? El argumento teórico de esta división entre *arte* y *naturaleza* se basaba en la distinción realizada por Aristóteles. Para el Estagirita, el *arte* sólo imita a la *naturaleza*, y sólo ésta poseía un principio interno de movimiento y reposo, capaz de generar un proceso dirigido a la reposición de ese mismo principio original. Sólo la naturaleza puede reproducirse, es decir, de un hombre nace un hombre, pero de una cama no nace otra cama (Aristóteles, 2009). Bacon critica la falta de método de los alquimistas de su época, así como la asociación que hace Paracelso entre la filosofía natural y la teología. Sin embargo, hace uso del conocimiento alquímico al proponer una concepción de la materia activa *"Porque los principios, fuentes, causas y formas del movimiento, es decir, los apetitos (appetitus) y las pasiones (passiones) de todas las clases de materia, son los objetos mismos de la filosofía"* (Bacon, 1963, Vol. III, p. 21-22). En este sentido, tiene sin duda una deuda con la tradición alquímica que subraya, por ejemplo, el lugar fundamental de los espíritus y las semillas en la constitución de los seres y los objetos naturales.

John Locke (1632-1704), autor del célebre *Ensayo sobre el entendimiento humano* (1690) seguirá el camino experimental trazado por Bacon y manejará también aspectos de la química en la elaboración de conceptos fundamentales de su filosofía (Locke, 1999). Sabemos que antes de ser conocido como filósofo, Locke fue un médico de renombre, miembro de la *Royal Society* y en estrecho contacto con los filósofos naturales. Entre los años 1659 y 1667, Locke estudió asiduamente la medicina y la química, adoptando en general los procedimientos del *quimiatra* J. B. van Helmont (1580-1644) (Anstey, 2010). Durante este período, Locke se hizo cercano a R. Boyle (1627-1691), habiendo sido incluso su ayudante de laboratorio y responsable de muchos de los experimentos presentados por el químico irlandés en su *The Sceptical Chemist* (1661), además de haber

leído y comentado varios manuscritos de Boyle incluso antes de sus publicaciones (Alexander, 1985).

Apoyado en la hipótesis corpuscular de la materia de Boyle, Locke se permitió discrepar del criterio geométrico-mecanicista adoptado por la tradición para distinguir las cualidades primarias y secundarias de la materia. Mientras que para Galileo, Descartes o Hobbes las cualidades primarias, es decir, las absolutamente inseparables de los cuerpos resultaban sólo del tamaño, la forma, el movimiento y la figura, Locke incluye la solidez y la textura, que no son cualidades propiamente geométricas. Boyle, en el *Origen de las formas y las cualidades* (1666), jerarquiza la materia en tres niveles distintos: a) los *minima naturalia*, o las partículas más simples que se encuentran en la naturaleza; b) los agregados o corpúsculos de segundo orden, formados por la adhesión extrema de las partículas más simples; y c) los cuerpos del mundo manifiestos a los sentidos humanos. Según nuestro químico, las partículas más simples son difíciles de romper o se rompen, en el límite, inalcanzables para los experimentos controlados.

Por eso Boyle se centra en los agregados corpusculares, es decir, los que resultan de la disposición de *partes mínimas*. Al fin y al cabo, son estos agregados corpusculares, que tienen ciertas disposiciones, es decir, ciertas texturas, los responsables de afectar a nuestros sentidos. La textura es, por tanto, una propiedad de los agregados de partículas, no es constitutiva de las partes mínimas, pero es esencial para la identificación por parte de los químicos de los corpúsculos constitutivos de una determinada muestra. De hecho, un 'átomo' no nos haría oler, colorear, saborear, etc., al fin y al cabo son las texturas de los corpúsculos las responsables de las diferentes naturalezas y propiedades de la materia. Dado que Boyle se ocupa de los efectos manifiestos de los cuerpos, tendrá que centrarse necesariamente en estos corpúsculos, ya que la investigación experimental ha revelado que tienen una existencia independiente y permanente. Si esto es así, entonces, según Boyle, si queremos concebir una clasificación de las sustancias químicas y comprender sus modos de funcionamiento e incluso sus efectos, debemos recurrir a estos corpúsculos y no a las diminutas partículas constitutivas de la materia, los *minima naturalia*. Por lo tanto, al considerar que la textura es una propiedad realmente existente en los cuerpos, y que su conocimiento es obra de los químicos, Locke asimila los resultados de las investigaciones químicas como parte inseparable en la construcción de sistemas filosóficos guiados por el método y la filosofía experimental (Zaterka, 2004, 2012).

En la Ilustración, la química interesó aún más a los filósofos. Por ejemplo, para Denis Diderot (1713-1784) la química era el modelo de una nueva filosofía experimental, práctica y operativa, que se enfrentaba y trataba de superar a la filosofía racionalista (Pépin, 2012). En cuanto a Jean-Jacques Rousseau (1712-1778), el punto de vista químico en la investigación e interpretación de la Naturaleza fue la fuente de conceptos centrales para su filosofía política. En efecto, si bien Rousseau describió métodos y conceptos como los del *análisis químico*, de los *instrumentos operativos* (naturales y químicos), los principios elementales y *mezclas* en sus *Institutions chymiques* (escritas en 1747 y recién publicadas a principios del siglo XX), también se comprometió con el proyecto de unas *Institutions politiques*, en las que esos conceptos se aplicaban en el esclarecimiento de los cuerpos individuales, los *mezclas* sociales y las fuerzas que actúan en las sociedades políticamente organizadas (Bernardi, 1999, 2006).

Ya el obispo George Berkeley (1685-1753), conocido por su interés en refutar las tesis ateas y materialistas, manifestó un gran interés por los temas científicos, especialmente en su última obra publicada, *Siris, una cadena de reflexiones e investigaciones filosóficas sobre las virtudes del agua de alquitrán y otros temas diversos* (1744). Ya desde el título podemos observar que la investigación sobre el agua de alquitrán motivó al pensador a realizar reflexiones médicas y químicas, además de filosóficas. También muestra conocimientos de las filosofías naturales de Wilhelm Homberg (1652-1715) y Hermann Boerhaave (1668-1738). En Siris, Berkeley afirma que existe una entidad llamada éter que sería la causa del vínculo entre el hombre y el mundo. Para lograr esta concepción discute ampliamente aspectos de la investigación sobre el aire, especialmente la perspectiva de Boyle en la que el aire contiene sal y por esta razón puede transformar el estado de los metales. A partir de esta discusión introduce el éter como el elemento más fundamental y primero, por lo tanto anterior al aire, y lo llama el 'alma del mundo'. El filósofo creía así que la química podía servir de base para una apologética que demostrara la existencia de Dios y la falsedad de cualquier interpretación materialista y atea de las transformaciones materiales (Peterschimitt, 2011).

Sin embargo, para Paul-Henri Thiry (1723-1789), el barón de Holbach, serviría para un propósito diametralmente opuesto, ya que la química fue decisiva para responder a dos cuestiones centrales que oponían su materialismo a las filosofías *teísta y deísta*: ¿cuál era el origen del movimiento? ¿La materia era *primitivamente* homogénea o heterogénea? Además de refutar las explicaciones externalistas, que consideraban que el

movimiento no se originaba en la materia, sino en una causa externa (Dios), d'Holbach, al igual que Diderot, admitía una heterogeneidad esencial de la materia, contradiciendo así las tesis que la tomaban como *una* y homogénea, como la de Boyle, por ejemplo (Bourdin, 1993, p. 264). Por último, el carácter empírico de la química y el concepto de 'quimismo', entendido como el conjunto de procesos dinámicos de la materia, fueron fundamentales para el desarrollo de la filosofía de la naturaleza de Friedrich Schelling (1775-1854), así como de otros seguidores de la *Naturphilosophie* alemana del siglo XIX, como la de Hegel (*cfr.* Lequan, 2010).

Por lo tanto, observamos que una pluralidad de filósofos se interesó por la química, lo que indica que los modos de colaboración entre la química y la filosofía fueron variados y no indujeron una única opción filosófica.

3. Autonomía e identidad disciplinar

¿Cuál es la identidad cognitiva de la química? ¿Podría percibirse esta identidad a lo largo de la historia? ¿Qué es propio de la química e irreductible a otras ciencias? ¿Cuáles son las entidades químicas y cómo se relacionan? ¿Cómo los representan los químicos en su estructura léxica y los relacionan con el mundo objetivo? ¿Qué nivel de materialidad interesa a los químicos? ¿Cómo definimos conceptos como *elemento químico, molécula, estructura, fase, valencia, aromaticidad, resonancia, quiralidad, mol*? ¿Es la ley periódica una ley natural? ¿Se puede axiomatizar la *tabla periódica*? Cuestiones como éstas apuntan a la necesidad permanente de que los químicos definan su territorio de investigación, con qué entidades materiales trabajan, cómo nombrarlas y clasificarlas, en definitiva, el establecimiento de una autonomía disciplinar para la química a nivel epistémico, metodológico y ontológico.

Por ejemplo, el concepto de 'elemento químico' es un tema de gran interés para educadores y filósofos de la química. Lo interesante es tratar de entender la historicidad del concepto, así como analizar críticamente las definiciones comúnmente empleadas en los libros de texto (Labarca, Zambon y Quintanilla, 2014). Así, se observa una importante diferencia entre el concepto de Antoine Lavoisier (1743-1794) y el que tendrán los químicos a partir de la segunda mitad del siglo XIX. Lavoisier, en el *Discurso preliminar de su Tratado elemental de química* publicado en 1789, ofrece una definición de 'cuerpos simples', utilizando otros términos como sinónimos, como 'elemento' o 'principio'. Según él, los químicos deben *"asociar el nombre de elemento o principio de los cuerpos*

con la idea del último término al que llega el análisis químico. Así, todas las sustancias que aún no se han descompuesto por ningún medio son para nosotros elementos" (Lavoisier 1965 [1789], p.xvii).

Sabemos que a principios del siglo XIX, en Inglaterra, el físico-meteorólogo John Dalton (1766-1844) propuso una hipótesis que permitía conocer los valores relativos de la masa de los 'cuerpos simples' que se combinaban durante una transformación química, por lo que el nuevo concepto no tenía relación con la filosofía atomista de los antiguos (Demócrito, Epicuro, Lucrecio). Para Dalton, el término 'átomo' se asociaba a las unidades materiales que entraban en las combinaciones químicas previstas por las leyes de las equivalencias, las proporciones simples y las proporciones múltiples, y recibía una representación gráfica que permitía escribir sus compuestos mediante fórmulas (Bensaude-Vincent, 1993, pp.150-151).

Sin embargo, para la aparición de un nuevo concepto de elemento químico fue fundamental la distinción entre 'átomos' y 'moléculas' propuesta por el físico Amedeo Avogadro (1776-1856). A partir de la hipótesis del físico italiano de que, en las mismas condiciones de temperatura y presión, volúmenes iguales de gases diferentes tienen el mismo número de moléculas, la noción de que éstas deben estar formadas por átomos (iguales o diferentes) se convirtió en objeto de controversia. Esta polémica se amplió a raíz de otra disputa entre químicos que defendían la teoría electrodualista de Jöns Berzelius (1779-1849) o la teoría de la sustitución de Jean-Baptiste Dumas (1800-1884). Ambas controversias adquirieron nuevos contornos con la 'teoría del tipo' de Charles Gerhardt (1816-1846) descrita en su *Tratado de Química Orgánica* (1854). Para intentar poner fin a las disputas sobre los términos y los modelos de representación, dos de los químicos más representativos de la época, August Kekule (1829-1896) y Charles Wurtz (1817-1884), organizaron el primer congreso internacional de químicos, que tuvo lugar en 1860 en la ciudad de Karlsruhe (*cfr.* Nye, 1994).

Esta distinción fue importante para que el químico Mendeleev señalara otra, la diferencia entre 'cuerpos simples' y 'elementos químicos'. Así, Mendeleev ya no consideraba estas expresiones como sinónimos, como había hecho Lavoisier. Por eso, dijo, *"encontramos el carbono en la naturaleza en forma de carbón, grafito y diamante, que son cuerpos simples, pero compuestos de un solo elemento, el carbono"* (Mendeleev 1895, Vol. 1, p. 36). Este fenómeno se denominó *alotropía* (del griego, *állos* – 'otro, diferente' y *tropos* – 'camino'), y la expresión 'elemento químico' ya no denotaba el

producto final de un proceso de análisis químico, sino que empezó a referirse a una medida relacional y abstracta, que eran las masas atómicas obtenidas por diversas técnicas experimentales. Por lo tanto, el concepto moderno de elemento químico se refiere a una entidad puramente abstracta que no tenía una existencia aislada, ya que sólo podía identificarse por sus relaciones de masa con otros elementos químicos (Bensaude-Vincent, 1996; Scerri, 2007).

Una definición más adecuada del concepto de 'elemento químico' surgió, sobre todo, de la necesidad pedagógica de los profesores de química del siglo XIX de clasificar y ordenar la multiplicidad de individualidades químicas. A partir de 1800, el número de cuerpos simples aumentó considerablemente con el uso de la pila de Alessandro Volta (1745-1827), pasando de los treinta y tres descritos por Lavoisier en su *Tratado Elemental* a más de sesenta en la década de 1850. ¿La química sería sólo un conjunto de monografías descriptivas sobre cada uno de estos cuerpos simples o habría una ley científica capaz de agruparlos según sus propiedades químicas y físicas? Ahora bien, como las propiedades químicas y físicas dependían de los 'pesos atómicos' de los elementos químicos constitutivos, era natural, decía Mendeleev, buscar una relación entre propiedades análogas. Esta fue la idea que le obligó a ordenar todos los elementos según el tamaño de sus masas atómicas, y que llevó a Mendeleev a enunciar una ley que describe la periodicidad de las propiedades de los elementos químicos. Según él, *"las propiedades de los cuerpos simples, al igual que las formas y propiedades de las combinaciones, son una función periódica de la magnitud del peso atómico"* (Mendeleev, 1895, Vol. 2, pp. 462-463, énfasis añadido).

El sistema periódico y las tablas derivadas de él no fueron un invento solitario de Mendeleev, ya que químicos como Julius Lothar Meyer (1830-1895), entre otros, también señalaron el fenómeno de la periodicidad. Sin embargo, es importante señalar que la ley periódica enunciada por el químico ruso se basa en tres postulados solidarios entre sí. El primero es epistemológico y consiste en la suposición de la existencia de una ley natural de la que se derivan consecuencias empíricas que pueden ser puestas a prueba experimentalmente. El segundo es ontológico, ya que Mendeleev era partidario de una heterogeneidad material original e irreductible. Así, el descubrimiento de una ley sería su respuesta a la hipótesis defendida por William Prout (1785-1850) a principios de siglo, quien consideraba que todos los cuerpos simples derivarían de una materia elemental homogénea, considerada provisionalmente como el hidrógeno. Finalmente, la distinción

entre cuerpos simples y elementos químicos, la heterogeneidad de los elementos y la existencia de una ley reguladora permitieron una nueva forma de ordenar y clasificar las entidades químicas, lo que permitió predecir los futuros descubrimientos que completarían la tabla periódica (Bensaude-Vincent, 2020).

El descubrimiento de la radiactividad y la existencia de los isótopos [del griego *isos* – 'igual' y *topos* – 'lugar'] plantearon serias dificultades a la 'manera química' empleada por Mendeleev para ordenar los elementos en la tabla periódica. El fenómeno de la isotopía, además de contradecir el segundo postulado de la hipótesis atómica de Dalton, según el cual átomos iguales tenían los mismos 'pesos atómicos', supuso un enorme desafío para la representación gráfica de la tabla periódica, ya que varios elementos podían ocupar el mismo lugar. Fue el radioquímico Friedrich (Fritz) Paneth (1887-1958) quien propuso una salida a esta crisis. La solución se basó en la observación de que elementos químicos con propiedades químicas idénticas, pero con masas atómicas diferentes, tenían una identidad física común: el número atómico. Esta nueva forma de identificar la unicidad de los elementos químicos se basó en los avances realizados por los físicos al investigar la naturaleza interna de los átomos a partir de la detección de que estaban formados por electrones (Thompson, 1897) y la detección de que estaban formados por protones (Soddy, 1912). De hecho, desde 1916 Paneth propuso asociar el número de protones presentes en el núcleo de los átomos al concepto de elemento químico (Paneth, 2003; Scerri, 2007). Tras la adopción de este criterio por la recién creada IUPAC (1919), Georges Urbain (1872-1938), otro filósofo-químico, analizó las razones químicas y físicas de esta elección. Para él, *"esta definición tiene la ventaja de resolver la cuestión de los isótopos, de modo que diferentes isótopos del mismo elemento químico son partes integrantes del mismo elemento"* (Urbain, 1925, p.48; Claro-Gomes, 2003).

Consideramos, por tanto, que la ley periódica y las tablas que buscan la mejor organización de los elementos químicos denotan un aspecto importante del significado de una autonomía cognitiva y una identidad disciplinar del conocimiento químico. Además de ser un icono de la ciencia química y una herramienta de trabajo para los químicos, la tabla periódica también despierta el interés de los filósofos, ya que se ha convertido en algo fundamental para analizar en detalle las características conceptuales de las tablas modernas. Así, los filósofos de la química han trabajado en análisis críticos sobre, por ejemplo, la distinción entre grupos y periodos, la explicación del sistema periódico a partir

de la estructura electrónica de los átomos, la mejor ubicación de los elementos, así como las diversas formas gráficas de la tabla periódica (Scerri, 2007; Scerri y Restrepo, 2018).

Otra cuestión que aborda las características de esta autonomía cognitiva está relacionada con el concepto emergentista de las propiedades químicas de la materia. Aquí nos limitaremos a recordar que, en la perspectiva emergentista, las propiedades de un determinado nivel de materialidad, aunque se deriven de un nivel inferior, son exclusivas de ese nivel. Incluso si las propiedades químicas surgieran de un universo físico más básico (subatómico), esto no implicaría que fueran reducibles a las propiedades de esas entidades físicas. De hecho, los propios teóricos de la perspectiva emergentista tienen en la química un territorio favorito de ejemplos de emergencia material, que satisfacen incluso la controvertida noción de causalidad descendente (*cfr.* Luisi, 2002). En este sentido, algunos filósofos sostienen que la química es autónoma tanto epistemológica como ontológicamente, ya que, según ellos, podemos tener un pluralismo ontológico, de modo que las entidades químicas, los enlaces químicos o los orbitales moleculares existen dentro de un ámbito ontológico propio de la química (*cfr.* Labarca y Lombardi, 2010; Llored, 2013; Lewowicz y Lombardi, 2013).

Al tratar de delimitar lo que sería un 'núcleo químico de la química', Joachim Schummer propuso una noción restringida, que pasara por la historicidad ontológica y epistemológica de sus definiciones, teorías o discursos para establecer precisamente lo que hacía de la química un conocimiento relativamente autónomo. Su estrategia consistía en describir paso a paso la construcción de esta autonomía a partir del comportamiento de las sustancias químicas en contextos materiales precisos. Este comportamiento indicaba una característica fundamental de la química, su interés por las sustancias y sus transformaciones provocadas por diferentes relaciones reactivas. Tanto la composición como la 'reactividad' de las sustancias químicas resultan, no de una esencialidad sustancial, sino de un juego de relaciones entre ellas. Estas sustancias no se conocían a priori, sino que se construyeron mediante procesos de purificación o síntesis y deben entenderse como los nodos de una red de relaciones. Según él, esto reveló que la estructura lógica de la sistematización y clasificación del conocimiento químico consistía en una peculiar organización en red de la dinámica relacional de las sustancias químicas (Schummer, 1998).

Pero, ¿sería posible encontrar en la historia de la química algunas características generales de esta autonomía cognitiva? Partiendo de la noción de estilo de pensamiento

desarrollada por A. Crombie e I. Hacking, que amplió el concepto y lo rebautizó como estilo de razonamiento, Bensaude-Vincent sugiere que también existe un estilo de razonamiento químico, forjado en el lugar sin el cual no habría conocimiento químico: el laboratorio. En otras palabras, la principal particularidad de la química estaría en el hecho de que es una ciencia que construye sus nociones y conceptos al mismo tiempo que produce los materiales relacionados con ellos. Este estilo de razonamiento químico presentaría tres características históricas llamativas: 1) es una forma de conocer haciendo; 2) su interés principal es la individualidad material y no el estudio de la materia en general y 3) representa un compromiso específico con la naturaleza. Desde sus laboratorios, los químicos consolidaron una tradición según la cual saber era sinónimo de saber hacer, de modo que el conocimiento de la naturaleza se basaba en su reconstrucción técnica. Por lo tanto, uno de los elementos centrales de un estilo de razonamiento químico y que denotan su autonomía cognitiva está en la producción de artefactos, de objetos artificiales que pueden o no tener ejemplares en la naturaleza (Bensaude-Vincent, 2009).

En definitiva, la autonomía e identidad epistémica de la química ha sido un terreno fértil para las investigaciones históricas y filosóficas. Además de los fundamentos conceptuales que conforman el conocimiento químico, las investigaciones sobre su autonomía disciplinar ofrecen también un ‘punto de vista’ químico sobre cuestiones más generales, como las relaciones de la química y su industria con la sociedad y el entorno natural.

4. Química, Sociedad y Ética

La química y sus productos se capilarizan permanentemente en las sociedades contemporáneas y en los entornos naturales. La ocupación del mundo por los productos de la industria química alcanzó una nueva escala a lo largo del siglo XX, con crecientes demandas tanto de la sociedad civil como del aparato militar. Aunque el carbón, la madera, la fundición y el acero siguieron siendo los materiales más utilizados en la sociedad, entraron en escena nuevos materiales, como el aluminio y otros metales ligeros, el caucho (natural y sintético), los polímeros sintéticos (como plásticos y elastómeros), la cerámica, el silicio o incluso los materiales compuestos e híbridos. Por ejemplo, los polímeros sintéticos derivados del petróleo son sin duda algunos de los materiales que más contribuyen a la ‘presencia’ humana en nuestra biósfera. Creados en los laboratorios de los químicos y producidos por la industria química, están presentes en la gran mayoría

de los objetos utilizados en nuestra vida cotidiana. Ligeros, baratos y resistentes, estos materiales sintéticos han sustituido progresivamente a los tradicionales y se han convertido en el símbolo de la modernidad en las últimas décadas. Son esenciales para el modo de vida contemporáneo, una importante creación de los químicos, prueba de la inventiva de los ingenieros, diseñadores industriales, metalúrgicos-arquitectos y, al mismo tiempo, una verdadera amenaza para el medio ambiente natural, quizá sin precedentes.

Esta capilarización que pretende representar el progreso social también genera, por tanto, preocupaciones y riesgos concretos. La asociación entre productos químicos y contaminación es innegable. Recordemos que fue en Gran Bretaña donde se consolidó la contaminación como efecto colateral de la Revolución Industrial y la urbanización de las ciudades, convirtiéndose en objeto de investigación científica. Así se determinaron los efectos de la contaminación atmosférica provocada por la combustión del carbón, concluyendo que los gases liberados eran la causa de un nuevo fenómeno 'natural', la 'lluvia ácida', además de ser la causa de los problemas respiratorios. Se empezaron a promulgar algunas leyes, como la que limitaba, por ejemplo, la quema de carbón en zonas urbanas y la que regulaba la producción de sustancias alcalinas y ácidas, cuya fabricación era señalada por las poblaciones vecinas como causante de la destrucción de entornos como los ríos y los bosques, hasta entonces considerados como bienes colectivos (Thorsheim, 2017).

Hoy en día experimentamos las consecuencias del manejo desenfrenado de los productos petrolíferos, especialmente del petróleo que, por un lado, es uno de los recursos naturales más importantes de la actualidad por la gran cantidad de productos que se fabrican a partir de él, y por otro, uno de los mayores promotores del calentamiento global, ya que su combustión es la principal fuente de emisión de gases como el metano y el dióxido de carbono. Al calentamiento global se suman las catástrofes medioambientales relacionadas con la propia extracción de petróleo, que a menudo provocan grandes vertidos en los mares que causan la muerte de miles de animales marinos y aves migratorias, además de los daños a la población local que vive en esos entornos.

Por ello, la desconfianza también se ha visto justificada por numerosos accidentes causados por productos químicos. De hecho, la química y el peligro son inseparables. Las demandas sociales para el establecimiento de regulaciones protocolarias dirigidas a la

protección de los trabajadores de las industrias químicas, su entorno ambiental y humano, así como de los consumidores, son fundamentales. Pero es necesario dejar de lado la ilusión de que todos los riesgos están controlados. Y es que los accidentes son habituales en la química, inscritos en las propias sustancias que manejamos y que se resisten a una domesticación total. A lo largo del siglo XX se registraron más de 30.000 accidentes o incidentes en todo el mundo (Bensaude-Vincent, 2020, p.294). Recordemos que en 2010 se produjo una gran explosión en la plataforma Deep Water Horizon en el Golfo de México, Estados Unidos, que provocó un daño ambiental incalculable para los seres humanos, la fauna y la flora (Ribeiro, 2012). En 2020 se produjo otro grave accidente que devastó el puerto y parte de la ciudad de Beirut, en el Líbano, provocado por el nitrato de amonio, esencial para la fabricación de fertilizantes, pero con su conocida propiedad explosiva. Así, mejor que fantasear con el riesgo cero, es necesario, además de la máxima prevención, promover la investigación que anticipe la reparación de los efectos de los accidentes, que siempre pueden ocurrir.

La respuesta convencional a la temeridad y la imagen pública negativa de la química ha sido meramente normativa. Tomemos, por ejemplo, los objetivos expuestos por la UNESCO con motivo de la promoción del Año Internacional de la Química en 2011: aumentar el aprecio y la comprensión de la química por parte del público para satisfacer las necesidades del mundo; estimular el interés de los jóvenes por la química; generar entusiasmo por el futuro creativo de la química; celebrar el papel de las mujeres en la química y conmemorar el centenario de la muerte de Marie Curie (1867-1934), Premio Nobel de Química (UNESCO, 2011). Sin embargo, el elogio de sus aspectos utilitarios, fundamentales para el modo de vida contemporáneo, su importancia para el progreso científico alcanzado, aunque necesario, no parece calmar la desconfianza del público y menos aún promover los valores cognitivos y sociales incrustados en el conocimiento químico (Schummer, Bensaude-Vincent y Tiggelen, 2007). Se necesita mucho más que meras normas o buena publicidad para que se produzca una verdadera comprensión y compromiso de la química con la sociedad y viceversa.

Ciertamente, el desconocimiento de la ciencia química y de las reflexiones filosóficas sobre ella ha sido un gran impedimento para profundizar en el debate público sobre sus productos. No somos tan groseros con la química mientras saboreamos el helado, el chocolate u otras delicias de la pastelería. Por ejemplo, apenas nos damos cuenta de que los postres que llamamos genéricamente ‘helados’ tienen una historia, ya

que empezaron a popularizarse gracias a la adición de productos químicos para conservarlos, lo que marcó el inicio de su industrialización en la segunda mitad del siglo XIX. Aparte de las nuevas técnicas de fabricación y del uso de frigoríficos desde principios del siglo XX, la conservación y el sabor del helado son muy difíciles de mantener durante mucho tiempo sin la ayuda de antioxidantes y aromas artificiales (Clarke, 2004).

Otro caso ejemplar del uso de la química en nuestra vida cotidiana lo encontramos en los procedimientos habituales en los salones de belleza de todo el mundo: tintes, mechas, alisados, etc. Las prácticas para cambiar el color del cabello se utilizan desde hace más de 2000 años. Los sajones, por ejemplo, eran personas que se pintaban la barba con colores intensos. Estas prácticas han continuado a lo largo del tiempo, ya sea por razones estéticas, para ocultar las canas, o culturales, para pertenecer a determinados grupos sociales. Los químicos descubrieron que el color del cabello depende de la melanina, una proteína presente en la corteza de los pelos que constituye las fibras a lo largo del cabello. Cuanto más oscuro es el pelo, más grandes son los gránulos de melanina. Con el envejecimiento, se observa cada vez más la ausencia de esta proteína, lo que reduce la pigmentación y da lugar a cabellos blancos. Esta demanda ha llevado al desarrollo de tintes para el cabello que pueden ser sintéticos, a base de óxido de plomo, acetato de plomo o amonio, por ejemplo, o naturales, como el que se extrae de la *Lawsonia inermis*, la henna, que da un color que va del marrón al rojizo. Los procesos de alisado, en cambio, emplean calor o un producto químico que actúa rompiendo los enlaces disulfuro, lo que permite que cambien de forma. Al utilizar planchas y cepillos, el calor se transfiere al cabello y así se consigue romper las interacciones moleculares entre las cadenas, cambiando la estructura de la fibra (García *et al.*, 2016, p.80).

Por lo tanto, la relación entre la química y la sociedad es siempre dinámica y su imagen pública puede variar según las demandas sociales reales o las creadas por las industrias para vender nuevos materiales. Este conocimiento se convierte en científico en la medida en que los químicos lo estructuran según los valores cognitivos admitidos por su comunidad disciplinaria. En este sentido, nos parece que en la construcción de su ciencia, los químicos no dejan de obedecer a valores cognitivos y metodológicos comunes a otras disciplinas científicas. Por ejemplo, como investigadores, los químicos consideran seguir lo que el filósofo H. Lacey llama el 'ideal de imparcialidad', que requiere que los valores éticos y sociales, así como su aplicabilidad, no jueguen un papel cognitivo en la

aceptación de sus teorías (Lacey, 2011). Sin embargo, las entidades químicas son objetos 'tecnocientíficos' y su evaluación cognitiva sigue siendo insuficiente para su producción en grandes cantidades y su consiguiente uso social. Aquí consideramos los objetos químicos como 'tecnocientíficos' en el sentido de que la química es una actividad científica que históricamente nunca ha separado lo que Bruno Latour llama el 'interior' (los laboratorios) y el 'exterior', que incluye desde el proceso de contratación de nuevos profesionales hasta la promoción de determinadas investigaciones o incluso la asimilación social de sus productos (Latour, 2003, Cap. 4). Tal vez una forma más objetiva sea pensar en una sociedad con química, tomando todos sus productos como *pharmaka* (*s. pharmakon*), para usar un término empleado por Jacques Derrida en su *Farmacia de Platón* (*cfr.* Derrida, 1968). La química puede ser tanto un remedio como un veneno, de modo que cuanto mejor sea el diálogo entre los químicos, la industria y la sociedad, menos efectos nocivos podrá tener.

Para ello, nos parece importante profundizar en las reflexiones y aclaraciones sobre cuestiones filosóficas, epistemológicas, metodológicas y valorativas propias de la actividad de los químicos y de sus relaciones con otras ramas de la ciencia y con la sociedad. Podemos ejemplificar esto con un tema muy importante para la actualidad, la cuestión de los transgénicos. Para desarrollar un estudio químico-epistemológico sobre la cuestión de los organismos modificados genéticamente (OMG), los transgénicos, se ha interesado por analizar el llamado principio de equivalencia sustancial. Este principio se estructura conceptualmente en la comparación cuantitativa de algunos componentes químico-biológicos de la planta transgénica con los no transgénicos (en su mayoría componentes ya conocidos). Los valores dentro de los 'estándares internacionales establecidos' permiten concluir que estas plantas son equivalentes a excepción de las características insertadas por transgénesis, y por tanto que estas nuevas plantas no presentarían más riesgos que las convencionales (Ferment, 2011, p.555). Desde el punto de vista químico, las aparentes similitudes de los componentes de macro y micronutrientes en los cultivos modificados genéticamente y sus homólogos convencionales establecidas mediante análisis químicos, por muy sofisticados que sean, no pueden revelar la presencia de componentes tóxicos desconocidos, así como de componentes alergénicos, que pueden ser el resultado, como sabemos, de efectos inesperados de la inserción de un nuevo gen en el genoma de la planta.

Así pues, es necesaria una reestructuración científica del principio de equivalencia sustancial que tenga en cuenta no sólo los factores cuantitativos relacionados con las macro/microestructuras, sino sobre todo los aspectos cualitativos de éstas. Ahora bien, con respecto a la función de los genes, no hay una regla única. Al fin y al cabo, es fundamental tener en cuenta la 'ecología de los genes', es decir, realizar un estudio en el que la regulación de las funciones metabólicas de los organismos esté en estrecha relación con una amplia red de secuencias genómicas interdependientes, que interactúan con los factores ambientales. Esto es necesario porque los análisis químicos propuestos no son capaces de relacionar por sí solos los posibles efectos de naturaleza bioquímica, toxicológica e inmunológica de los alimentos transgénicos, ya que sólo se tienen en cuenta los análisis de composición química, molecular y analítica de los productos transgénicos. La equivalencia buscada se refiere más exactamente a la cantidad o a algo medible que puede ser comparado técnicamente. En términos comparativos, los genomas de una planta natural y de un organismo transgénico no son equivalentes. De hecho, sólo serían equivalentes si una se originara a partir de la otra por multiplicación vegetativa. Por las propias técnicas utilizadas, la construcción genética insertada en la planta contiene elementos distintos a los que se encuentran en el alimento original, lo que puede proporcionar nuevos productos génicos que pueden desencadenar graves efectos pleiotrópicos, es decir, cambios drásticos, perjudiciales e inesperados.

El interior de una célula es totalmente diferente al de un tubo de ensayo. Los componentes 'interferentes' eliminados en la purificación pueden ser cruciales para la función biológica o la regulación de la molécula purificada. El reto consiste en comprender las influencias de la organización celular y las asociaciones macromoleculares en la función de las enzimas individuales y otras biomoléculas. Ahora bien, la química contemporánea, al tener en cuenta el ámbito de la complejidad y la interdisciplinariedad, hace tiempo que se ha distanciado de sus orígenes modernos reduccionistas. Los riesgos asociados a una determinada variedad transgénica dependen de interacciones absolutamente complejas derivadas de las modificaciones genéticas, de la historia natural de los organismos implicados y también de las propiedades del ecosistema en el que se libera el OMG (Nodari y Guerra, 2001, p.89).

Estos riesgos crecen y son más difíciles de evaluar y controlar a medida que aumenta la superficie de cultivo. Estamos en el nivel del ecosistema y no de una célula aislada o de un tubo de ensayo. Los primeros se refieren a los impactos sociales reales,

los segundos se limitan a las pruebas realizadas en algunas plantas en los laboratorios. Así, cuando los químicos o los biólogos moleculares afirman que no se han detectado efectos adversos significativos en determinados OMG, se refieren a análisis realizados en unas pocas células. Si desde el punto de vista químico-biológico-toxicológico no se puede dar cuenta de la investigación sobre unas pocas plantas, ¿qué podemos decir de la validez científica de dicha investigación a mayor escala, teniendo en cuenta, por ejemplo, explotaciones o regiones enteras? El problema de lo vivo, a diferencia de la materia inerte relacionada estrictamente con los fenómenos físicos, es que implica y tiene efecto a través de un gran número de vías que son desde el punto de vista causal y determinista inoperantes, lo que implica la dificultad de explicaciones deterministas y completas. El principio de equivalencia sustancial opera dentro de una estrategia descontextualizada y, por tanto, reduccionista, que luego no aborda los posibles efectos de los alimentos transgénicos en su interacción con las plantas, los animales y el medio ambiente. En otros términos, la equivalencia sustancial, tal como se ha formulado hasta ahora, no puede considerarse científica, ya que el principio es simplemente una herramienta conceptual para los productores de alimentos y los reguladores gubernamentales, y no especifica, ni limita el tipo o la cantidad de pruebas para los nuevos alimentos (Zaterka, 2019).

A través de estos estudios queda clara la omnipresencia de la química en nuestras vidas y la necesidad de realizar estudios que tengan en cuenta la relación entre la química, la sociedad y la ética. Por ejemplo, si tomamos uno de los campos de la ética, la deontología, que trata de la acción correcta y de la naturaleza del deber, y lo aplicamos a la investigación científica, nos vemos abocados a admitir que, en principio, todo experimento científico implica una medida de riesgo y, por tanto, de responsabilidad. Esto se debe a que cualquier acción que interfiera en la evolución espontánea de la naturaleza o en los mecanismos ordinarios de cambio de la sociedad humana puede causar algún efecto indeseable.

Un ejemplo son las decisiones tomadas en el campo de la química de síntesis orgánica. A diferencia de otras ramas de la ciencia, los productos científicos de la química sintética no son sólo ideas, sino también nuevas sustancias que cambian nuestro mundo material, en beneficio o perjuicio de los seres que lo habitan. Sin embargo, como la síntesis modifica el mundo material, la ganancia de conocimiento debe compararse con el aumento del no conocimiento o del desconocimiento, definido por el número de sus propiedades que permanecen desconocidas. Con cada producción de una nueva sustancia,

el ámbito de lo incognoscible aumenta por el número de propiedades indeterminadas de la nueva sustancia, así como por toda la reactividad química de las sustancias existentes con la nueva. Así, en general, la síntesis de nuevas sustancias produce mucho más no-conocimiento que conocimiento, aunque esto puede ser diferente en casos particulares en los que la síntesis se lleva a cabo para mejorar o calificar un conocimiento más general. Esto no sólo es difícil de conciliar con la visión tradicional de la ciencia como actividad productora de conocimiento, sino que también cabe preguntarse si los químicos sintéticos deben asumir alguna responsabilidad por el conocimiento químico general sobre el mundo material, considerado como un bien público. Más allá del interés académico, la producción de no-saber mediante la síntesis de nuevas sustancias es de interés general, porque si las nuevas sustancias salen de los laboratorios y pasan a formar parte de nuestro entorno material, esto aumenta necesariamente su complejidad química.

Para Schummer (2001), es precisamente esta complejidad la que hace que la química sintética, entre todas las demás ramas de las ciencias naturales, sea la más peculiar cuando consideramos la química desde principios éticos. Así, la cuestión ética propia de los químicos sintéticos es si ellos, como individuos y como comunidad investigadora, deben ser considerados responsables de cualquier daño medioambiental causado por su nueva sustancia. Aunque los propios químicos sintéticos no introduzcan sus nuevas sustancias en el medio ambiente, ni las promuevan para su uso comercial, su primera síntesis de una sustancia es el paso causal crucial para su existencia y los posibles daños causados por ella. En principio, pues, los químicos sintéticos, como creadores libres de nuevas sustancias, podrían ser considerados responsables de todos los posibles daños causados por sus creaciones.

El mismo fenómeno se observa en la producción de nanoestructuras, ya sea reduciendo las dimensiones existentes o formando nuevas disposiciones moleculares, para crear efectos químicos, biológicos y físicos aplicables en una amplia gama de actividades industriales y tecnológicas. En este último caso tenemos la aparición de un nuevo campo de investigación química, la nanoquímica. La síntesis de nanoestructuras y nanomateriales mediante el uso de materiales supramoleculares y biomiméticos que dan lugar a materiales nanoestructurados 'de abajo hacia arriba' (*bottom-up*) son los fundamentos de la nanoquímica. La nanoquímica tiene dos aspectos importantes. Uno de ellos está asociado a la obtención de conocimientos sobre las particularidades de las propiedades químicas y la reactividad de las partículas nanoestructuradas, lo que alimenta

la investigación en este campo de la química. Otro aspecto, ligado a la nanotecnología, consiste en la aplicación de la nanoquímica a la síntesis, modificación y estabilización de nanopartículas individuales y por su autoensamblaje dirigido para dar nanoestructuras más complejas (Steed, Turner y Wallace, 2007; Sergeev y Klabunde, 2013).

La exigencia del buen uso de los conocimientos químicos y del cuidado de los efectos de sus productos forma parte de los principios de conducta profesional establecidos por los organismos nacionales que representan a los químicos. Por ejemplo, en el código de conducta de la *American Chemical Society* (ACS), se espera que sus miembros contribuyan a *"la mejora de las cualificaciones y la utilidad de los químicos mediante altos niveles de ética profesional, educación y logros (...)"*. Así, *"el profesional de la química debe esforzarse por hacer avanzar la empresa química lo más ampliamente posible en beneficio de la tierra y de sus habitantes y tiene obligaciones con el público, con los colegas y con la ciencia"* (*The Chemical Professional´s Code of Conduct*, 2021). En Brasil, la exigencia de ética profesional para los químicos está regulada por una Resolución Ordinaria (927/70) del *Conselho Federal de Química*, que establece lo que el químico debe y no debe hacer (Código de Ética, 1970). Sin embargo, en estos dos casos, se contenta con principios generales y corporativos, compartidos por las demás profesiones con añadidos puntuales, además de tomar al público como simple receptor/consumidor de productos químicos. Sin embargo, para avanzar en el debate sobre cuál debe ser el mejor proceder profesional del químico, Kovac señala que es necesario algo más que máximas normativas y/o morales, pues sin una adecuada comprensión del proceso histórico de autodefinición de la química como profesión (sus códigos internos de funcionamiento), se opaca la relación intrínseca entre la ética y la propia epistemología, así como las complejas relaciones entre estos profesionales y la sociedad (Kovac, 2006).

Por último, un ejemplo de resultado concreto de esta expansión de las demandas sociales para un mayor control social y ético de los productos químicos fue la promulgación por parte de la Unión Europea del reglamento Reach (Registration, Evaluation and Autorisation of Chemicals), que entró en vigor en junio de 2007. Este reglamento establece de forma innovadora las condiciones de registro, evaluación y autorización de las sustancias químicas. El objetivo de Reach es mejorar el conocimiento de los efectos de las sustancias en la salud humana y el medio ambiente mediante una gestión más eficaz de los riesgos relacionados con el uso de estos productos. El

reglamento establece diversas disposiciones, así como las obligaciones que incumben a los productores e importadores de sustancias químicas, lo que tiene como efecto invertir la tarea de demostrar la toxicidad de un producto de las autoridades públicas a las industrias. A partir de ese momento, correspondería a la industria demostrar que su producto cumple la normativa, y no a las autoridades públicas demostrar que no lo hace. El análisis del expediente de cada sustancia y el control del cumplimiento de la normativa corren a cargo de la Agencia Europea de Sustancias y Preparados Químicos (Echa). Para sus partidarios, el reglamento Reach supone un cambio de paradigma, ya que introduce profundos cambios en los procedimientos de autorización de la comercialización de un producto químico. Además de aumentar la precaución presente y futura con respecto a los seres humanos y el medio ambiente por la acción de estos productos, el reglamento también favorecería la investigación científica y la competitividad de las industrias químicas europeas, además de ser una barrera de mercado para los fabricantes que no lo obedezcan (Sillion, 2020, p.313).

Sin embargo, estos protocolos de seguridad siguen siendo limitados y se circunscriben a determinadas regiones geográficas. De hecho, muchos de los peligros potenciales causados por las sustancias químicas están distribuidos de forma desigual, además de la conocida transferencia de materiales contaminados de los países industrializados a los países pobres de América Latina, África y Asia. Los productos químicos estuvieron presentes en las grandes catástrofes del siglo XX (Auschwitz, Nagasaki, Bhopal, Chernóbil), por lo que, si los Estados nacionales y las industrias químicas globalizadas no elaboran protocolos éticos internacionales, es poco creíble que se produzcan cambios a corto plazo en la escalada de contaminación y en las posibles nuevas tragedias causadas por los productos químicos y su industria.

5. A modo de conclusión

En las últimas décadas, la filosofía de la química se ha consolidado como un área de investigación institucionalmente reconocida. Sin embargo, esto no significa que sólo a partir de ese momento los químicos y los filósofos comenzaran a trabajar en temas comunes. Tampoco significa que esta nueva disciplina académica posea un corpus teórico homogéneo y bien definido. De hecho, los investigadores más destacados en este campo, como R. Harré, D. Baird, E. Scerri, J. Schummer, J. van Brakel, B. Bensaude-Vincent, O. Lombardi, H. Chang, divergen en puntos importantes. Sin embargo, estas divergencias

sólo existen en la medida en que todas ellas parten de una base común, que consiste en tomar el conocimiento químico como una forma de pensar y hacer del ser humano.

En química, la teoría y la práctica son inseparables. No se trata de la tradicional cuestión de precedencia, sino de un proceso en el que uno no existe sin el otro. Es decir, el conocimiento químico surge de un modo singular de investigación del mundo material, en el que la experimentación y la teorización están en permanente tensión. Por tanto, ya sea el alquimista medieval, el químico *aficionado* de la época de la Ilustración o el químico formado según el modelo de la escuela de J. Liebig, ninguno de ellos considera posible la existencia de un conocimiento químico sin un *lugar específico* en el que se manipule efectivamente la materialidad del mundo. Así, coincidimos con aquellos autores que consideran el *laboratorio* de alquimistas y químicos como el *espacio* (social, instrumental, industrial, pedagógico...), no sólo de producción de *artefactos* químicos, sino como articulador de análisis que reúnen a químicos, historiadores y filósofos. Es decir, aún con diferentes preguntas por resolver, químicos, historiadores y filósofos se interesan por lo que entra y lo que sale de un *laboratorio*, porque un conjunto de valores (sociales, epistémicos, comunitarios...) están implicados en los procesos de manipulación y transformación del mundo que habitamos (Bensaude-Vincent y Simon, 2008).

Por último, en los últimos años, además del creciente interés por la filosofía de la química, hemos asistido a un 'giro material' (*material turn*) en la filosofía y la historia de la ciencia, interesado en situar los instrumentos, los objetos, los materiales y las prácticas en el centro de los relatos históricos. Así, tras este 'giro material', corresponde a la filosofía y la historia de la química tomar los productos químicos, las sustancias químicas que los crean y las industrias que los fabrican como parte de la cultura, la sociedad y la política. Los materiales han dado forma a los químicos y a su ciencia estimulando la fundación o reorganización de campos disciplinarios, comunidades epistémicas, conjuntos de herramientas e instrumentación, representaciones cognitivas y prácticas experimentales. Existe, pues, una co-construcción del sujeto químico y del objeto de la química. Además, los nuevos materiales y sus compuestos químicos contribuyen a iniciar nuevos comportamientos en la sociedad, como la reconfiguración de los hábitos de consumo en torno al número cada vez mayor de materiales sintéticos utilizados en los productos comerciales. En los últimos dos siglos, los químicos y la industria química han llegado a desempeñar, en cierto modo, un papel de arquitectos tanto de la materia como de la sociedad (Teissier *et al.*, 2017; Werrett, 2019).

Por tanto, las entidades materiales que los químicos han producido y producen son partícipes tanto de la historia de la humanidad como de la historia de nuestro planeta. Podemos considerar entonces que los nuevos materiales y las configuraciones sociales orientan a los químicos a perseguir algunas cuestiones de investigación y a descuidar otras, de modo que los productos de la química integran, además de los valores cognitivos internos a la disciplina, intereses económicos, demandas sociales, médicas, militares o medioambientales. Acercar la química al debate público no es una mera cuestión de publicitarla, sino de promover el esclarecimiento de las implicaciones de las opciones productivas y sociales en la asimilación de los productos de su industria, a menudo impulsadas por intereses puramente económicos. La investigación sobre la filosofía y la historia de la química puede aportar información que ayude en este proceso de clarificación de la naturaleza y las características del conocimiento químico. Esta información será útil en las distintas etapas de la enseñanza de la química, especialmente en la formación de los futuros químicos, pero también para el público en general y los responsables institucionales, ya que puede contribuir a aclarar los contextos económicos, sociales y medioambientales en los que están presentes la química y su industria.

Referencias bibliográficas

Alexander, P. (1985). *Ideas, Qualities and Corpuscles: Locke and Boyle on the External World*. Cambridge: Cambridge University Press.

Anstey, P. (2010). "John Locke and Helmontian Medicine". En: Wolfe, C. y Gal, O. (eds.), *The Body as Object and Instrument of Knowledge: Embodied Empiricism in Early Modern Science*. Dordrecht: Springer, pp.93-117.

Aristóteles (2009). *Física I-II*. Prefácio, introdução, tradução e comentários de Lucas Angioni. Campinas: Editora UNICAMP.

Bacon, F. (1963). *The Works of Francis Bacon*. Edição e tradução de James Spedding, Robert Leslie y Douglas D. Heath, 14 v. London: Longman & Co. 1857-1874; reimpressão Stuttgart/Bad-Cannstatt, Fr. Frommann, G. Holzboog.

Baird, D.; Scerri, E. y McIntyre, L. (Eds.) (2006). *Philosophy of Chemistry*. Dordrecht: Springer.

Bensaude-Vincent, B. (1993). *Lavoisier: mémoire d'une révolution*. Paris: Flammarion.

Bensaude-Vincent, B. (1996). "Mendeleiev: história de uma descoberta". En: Serres, M. (ed.). *Elementos para uma História das Ciências. III. De Pasteur ao Computador*. Tradución de Pacheco, R.; Figueiredo, M.; Costa, A. P. y Simões, A. Lisboa: Terramar, pp.77-102.

Bensaude-Vincent, B. (2005). "Chemistry in the French tradition of philosophy of science: Duhem, Meyerson, Metzger and Bachelard". *Studies in History and Philosophy of Science* 36: 627-649.

Bensaude-Vincent, B. (2008a). “L’énigme du mixte“. En: *Matière à penser: Essais d’histoire et de philosophie de la chimie*. Paris: Presses Universitaires de Paris Ouest, pp.51-64.
Bensaude-Vincent, B. (2009). “The chemist’s style of thinking”. *Berichte zur Wissenschaftsgeschichte* 32: 365-378.
Bensaude-Vincent, B. (2009). “Philosophy of Chemistry”. En: Gayon, J. y Brenner, A. *French Sudies in the Philosophy of Science. Contemporary Research in France*. Dordrecht: Springer, pp.165-187.
Bensaude-Vincent, B. (2020). “Chercher l’unité dan la multiplicité: diverses options de classification”. En: Bensaude-Vincent, B. y Eastes, R-E. *Philosophie de la Chimie*. Paris: DeBroeck Supérieur, pp.186-190.
Bensaude-Vincent, B. y Simon, J. (2008). *Chemistry. The Impure Science*. London: Imperial College Press.
Bensaude-Vincent, B. y Eastes, R-E. (2020). *Philosophie de la Chimie*. París: DeBroeck Supérieur.
Bernardi, B. (1999). “Constitution et gouvernement mixte. Notes sur le livre III du ContratSocial”. *Corpus*, *Reveu de philosophie* 36: 163-194.
Bernardi, B. (2006). *La fabrique des concepts. Recherches sur l’invention conceptuelle chez Rousseau*. Paris: Honoré Champion.
Bourdin, J-C. (1993). “La platitude matérialiste chez d’Holbach”. *Corpus. Revue de Philosophie* 22/23: 251-258.
Brakel, J. van. (2000). *Philosophy of Chemistry*. Leuven: Leuven University Press.
Clarke, C. (2014). *The Science of Ice Cream*. London: Royal Society of Chemistry Press.
Claro-Gomes, J. M. (2003). *Georges Urbain (1872-1938). Chimie et philosophie*. Lille: ANRT.
Clericuzio, A. (2000). *Elements, Principles and Corpuscles: A Study of Atomism and Chemistry in the Seventeenth Century*. International Archives of the History of Ideas, 171. Dordrecht/Boston/London: Kluwer Academic Publishers.
Clericuzio, A. y Rattansi, P. (Eds.) (1994). *Alchemy and Chemistry in the 16th and 17th centuries*. Dordrecht/Boston/London: Kluwer Academic Publishers.
Código de Ética. 1970. <https://www.crq4.org.br/codigo_de_etica>. Acceso: E n e r o 2021.
Debus, A. G. (1965). *The English Paracelsians*. London: Oldbourne.
Debus, A. G. (1996) [1978]. *El hombre y la naturaliza en el Renacimiento*. Traductión de Sergio Lugo Rendón. Ciudad de México: Fondo de Cultura Económica.
Debus, A. G. (2002) [1972]. *The Chemical Philosoph*y. Mineola/New York: Dover Publication.
Debus, A. (1997). *The Chemical Philosophy*. New York: Dover Publication. Derrida, J. (1968). “La pharmacie de Platón”. *Tel Quel* (32).
Dirac, P. (1929). “Quantum Mechanics of Many-Electron-Systems”. *Proceeding of the Royal Society* A 123: 714-733.
Engels, F. (1976). *A Dialética da Natureza*. São Paulo: Paz e Terra.
Erduran, S. (2001). “Philosophy of Chemistry: An Emerging Field with Implications for Chemistry Education”. *Science & Education* 10: 581-593.
Ferment, G. (2011). “Análise de risco das plantas transgênicas: princípio da precaução ou precipitação?”. En Zanodi, M. y Fement, G. (org.) *Transgênicos para quem?* Brasília: Ministério do Desenvolvimento Agrário.
Garcia, J. S. y Mello, P. H. (2016). *Contém química.* Coleção o que é ser cientista. São Bernardo do Campo: Editora da UFABC.
Gois, J. (2012). *A significação de representações químicas e a filosofia de Wittgenstein*. Tese de doutorado, sob a orientação de Marcelo Giordan. Faculdade de Educação, Universidade de São Paulo (USP).

Gois, J. y Ribeiro, M. A. P. (Org.) (2019). *Filosofia da Química no Brasil*. Porto Alegre: Editora Fi.
Hartung, G. (2008). "The "Chymistry Laboratory": On the Function of the Experiment in Seventeenth-Century Scientific Discourse". En: Schramm, H.; Schwarte, L.; Lazardzig, J. (eds). *Instruments in Art and Science. On the Architectonics of Cultural Boundaries in the 17th Century*. Berlin: Walter de Gruyter, pp.201-221.
Joly, B. (1992). *Rationalité de l'Alchimie au XVIIe siècle*. Paris: Vrin.
Joly, B. (2007). "À propos d'une prétendue distinction entre la chimie et l'alchemie au XVIIe siècle: Questions d'histoire et de méthode". *Revue d'histoire des sciences* 60: 167-184.
Joly, B. (2011). *Descartes et la chimie*. Paris: Vrin.
Kahn, D. (2016). *Le fixe et le volatil. Chimie et alchimie de Paracelse à Lavoisier*. Paris: CNRS Éditions.
Kovac, J. (2006). "Professional Ethics in Science". En: Baird, D.; Scerri, E. y McIntyre, L. (Eds.). *Philosophy of Chemistry. Synthesis of a New Discipline*. Dordrecht: Springer.
Kovac, J. (2018). *The Ethical Chemist. Professionalism and Ethics in Science*. Oxford/New York: Oxford University Press.
Koyré, A. (1966). *Études Galiléennes*. Paris: Hermann.
Koyré, A. (1982a) [1963]. "Perspectivas da história das ciências". En: *Estudos de história do pensamento científico*. Tradución de Márcio Ramalho. Rio de Janeiro/Brasília: Forense-Universitária/Editora Universidade de Brasília.
Koyré, A. (1982b) [1943]. "Galileu e Platão". En *Estudos de história do pensamento científico*. Tradución de Márcio Ramalho. Rio de Janeiro/Brasília: Forense Universitária/Editora Universidade de Brasília.
Koyré, A. (1997) [1955]. *Paracelse*. Paris: Éditions Allia.
Labarca, M.; Zambon, A. y Quintanilla, M. (2014). "Aspectos históricos-filosóficos del concepto de «elemento». Aportes para la formación inicial y contínua de professores de ciencias". En Quintanilla, M.; Rosales, S. D. y Castillo, H. C. (orgs.). Santiago de Chile: Editorial Bellaterra, pp.233-249.
Labarca, M. y Lombardi, O. (2010). "Acerca del status ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos". *Principia* 14: 309-33.
Labarca, M.; Bejarano, N. y Eichler, M. L. (2013). "Química e Filosofia: Rumo a uma frutífera colaboração". *Química Nova* 36: 1256-1266.
Lacey, H. (2011). "A imparcialidade da ciência e as responsabilidades dos cientistas". *Scientia Studia* 9: 487-500.
Latour, B. (2019). *Investigação sobre os modos de existência. Uma antropologia dos modernos*. Traducción de Alexandre Agabiti Fernandez. Petrópolis: Editora Vozes.
Lavoisier, A. (1965) [1789]. *Traité Élémentaire de Chimie. Présenté dans un ordrenouveau et d'apès les découvertes modernes*. Bruxelles: Culture et Civilisations.
Lequan, M. (2010). "1797-1799: d'une 'Philosophie de la chimie' au Chimisme en philosophie. Les premières écrites de Schelling sur la nature". *Dix-huitième Siècle* 42: 491-512.
Llored, J. P. (2013). *"Chimie, chimie quantique, et concept d'emergence: étude d'une mise en relation"*. Thèsede doctorat souteneu à l'Ecole Polythecnique et à l'Université Libre de Bruxelles. Direction de Michel Bitbol et Isabelle Stengers.
Locke, J. (1999). *Ensaio acerca do entendimento humano*. Tradución de Anoar Aiex. São Paulo: Nova Cultural.
Luisi, P. L. (2002). "Emergence in Chemistry: Chemistry as the Embodiment of Emergence". *Foundations of Chemistry* 4: 183-200.

Mendeleev, D. (1890). *Principes de chimie*. 2 volumes. Traducido del russo por M. E. Achkinasi y M. H. Carrion. Paris: Bernard Tignol.
Mocellin, R. C. (2011). *Louis-Bernard Guyton de Morveau: Chimiste et Professeur au Siècle des Lumières*. Saarbrücken: Éditions Universitaires Européennes.
Moran, B. (2005). *Distilling Knowledge: Alchemy, Chemistry and the Scientific Revolution*. Harvard: Harvard University Press.
Neto, W. N. A. (2009). *Formas de uso da noção de representação estrutural no Ensino Superior de Química*. Tese de dourado em Educação, sob a orientação de Paulo Porto. Universidade de São Paulo (USP).
Newman, W. (2006). *Atoms and Alchemy: Chymistry & the Experimental Origins of the Scientific Revolution*. Chicago: University Chicago Press.
Newman, W. (2019). *Newton the Alchemist. Science, Enigma, and the Quest for Nature's "Secret Fire'*. Princeton/Oxford: Princeton University Press.
Nodari, R. y Guerra, M. P. (2001). "Avaliação de riscos ambientais de plantas transgênicas". *Cadernos de Ciência & Tecnologia* 18: 1-116.
Nye, M. J. (1994). *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry. Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines, 1800-1950*. Berkeley/Los Angeles/London: University of California Press.
Pagel, W. (1989) [1982]. *Paracelso. Un'introduzione ala medicina filosófica nell'età del Rinascimento*. Traducción italiana de Michele Sampaolo. Milano: Il Saggiatore.
Paneth, F. A. (2003) [1931]. "The Epistemological Status of the Chemical Concept of Element". *Foundations of Chemistry* 5: 113-145.
Pépin, F. (2012). *La Philosophie expérimental de Dierot et la chimie*. Paris: Garnier.
Peterschmitt, L. (2011). *Berkeley et la chimie*. Paris: Classiques Garnier.
Principe, L. (2013). *The Secrets of Alchemy*. Chicago/London: The University of Chicago Press.
Renault, E. (2002). *Philosophie chimique: Hegel et la science dynamiste de son temps*. Bordeaux: Presses Universitaires de Bordeaux.
Ribeiro, H. (2012). "Impactos da exploração do petróleo na saúde humana". *Revista da USP* 95: 61-71.
Ribeiro, M. A. P. (2014). *Integração da filosofia da química no currículo de formação inicial de professores. Contributos para uma filosofia do ensino*. Tese de doutorado. Orientadores Ricardo Lopes Coelho e Maria Helena Peralta. Universidade de Lisboa.
Scerri, E. (2007). *The Story of the Periodic System. Its Story and Its Significance*. Oxford/New York: Oxford University Press.
Scerri, E. (2009). *Selected Papers on the Periodic Table*. London: Imperial College Press.
Scerri, E. y Fisher, G. (Eds.) (2016). *Essays in the Philosophy of Chemistry*. New York: Oxford University Press.
Scerri, E. y Restrepo, G. (2018). *Mendeleev to Oganesson. A Multidisciplinary Perspective on the Periodic Table*. New York/Oxford: Oxford University Press.
Schummer, J. (1998). "The Chemical Core of Chemistry". *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry* 4: 129-162.
Schummer, J. (2001). "Ethics of Chemical Synthesis". *Hyle - International Journal for Philosophy of Chemistry* 7: 103-24.
Schummer, J. (2011). "La filosofía de la química. De la infancia hacia la madurez". En: Baird, D.; Scerri, E. y McIntyre, L. (eds.). *Filosofia de la química. Síntesis de uma nueva disciplina*. Tradución de Gerardo Noriega. Ciudad de México: Fondo de Cultura Económica, pp.36-68.

Schummer, J.; Bensaude-Vincent, B. y Tiggelen, B. van (Eds.). (2007). *The Public Image of Chemistry*. New Jersey/London: World Scientific.

Sergeev, G. B. y Klabunde, K. J. (2013) [2006]. *Nanochemistry*. Amsterdam: Elsevier.

Shapin, S. y Schaffer, S. (1985). *Leviathan and the Air-Pump: Hobbes, Boyle, and the experimental life*. Princeton: Princeton University Press.

Sillon, B. (2020). REACH: un outil pour améliorer le dialogue entre chimie et société. En: Bensaude-Vincent, B. y Eastes, R-E. (Eds.). *Philosophie de la chimie*. Paris: Deboeck Superieur, pp.313-317.

Smith, P. (1994). *The Business of Alchemy: Science and Culture in the Holy Roman Empire*. Princeton: Princeton University Press.

Steed. J.; Turner. D. y Wallace, K. (2007). *Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry*. West Sussex: John Wiley & Sons.

Teissier, P. (2014). *Une histoire de la chimie du solide. Synthèses, formes, identités* Paris: Hermann.

Thorsheim, P. (2017). *Inventing Pollution. Coal, Smoke, and Culture in Britain since 1800*. Athens: Ohio University Press.

Unesco. International Year of Chemistry. <http://www.unesco.org/new/en/natural sciences/science-technology/basic-sciences/chemistry/international-year-of-chemistry/>. Acceso: Agosto 2021.

Urbain, G. (1925). *Les notions fondamentales d'élément et d'atome*. Paris: Gauther Villars.

Webster, C. (2008). *Paracelsus, Medicine, Magic and Mission at the End of Time*. New Haven/London: Yale University Press.

Werrett, S. (2019). *Thrifty Science. Making the Most of Materials in the History of Expermiment*. Chicago: University of Chicago Press.

Zaterka, L. (2004). *A Filosofia Experimental na Inglaterra do século XVII*. São Paulo: Humanitas.

Zaterka, L. (2012). "As teorias da matéria de Francis Bacon e Robert Boyle: forma, textura e atividade". *Scientiae Studia* 10: 681-709.

Zaterka, L. (2019). "Transgênicos e o princípio de equivalência substancial". *Estudos Avançados* 95: 279-284.

CAPÍTULO 2

La concepción de 'elemento químico': desde la Antigüedad a las discusiones actuales

Alfio Zambon y Fiorela Alassia

Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco

Lo supieron los arduos alumnos de Pitágoras:
los astros y los hombres vuelven cíclicamente;
los átomos fatales repetirán la urgente
Afrodita de oro, los tebanos, las ágoras.

Jorge Luis Borges, "La noche cíclica"

1. Introducción

El problema de la naturaleza de los elementos tiene un origen lejano. Es posible rastrearlo en los inicios de la filosofía, en los pensadores presocráticos. Sin embargo, interpretando libremente a Borges en el verso del poema que usamos como epígrafe, '…los hombres vuelven cíclicamente' sobre él. Así como 'lo supieron los arduos alumnos de Pitágoras' (y las otras escuelas filosóficas de la época), parafraseando -y tal vez forzando- la hipálage de Borges, los 'arduos' interesados en los fundamentos de la química actuales se enfrentan a un problema que, a primera vista, parece relativamente asequible y que, sin embargo, a poco de internarse en los vericuetos teóricos que lo constituyen, se vuelve poblado de complejidad, desconcierto, contradicciones, dudas. Así, las certezas iniciales se diluyen irremisiblemente en un laberinto conceptual.

En este capítulo abordaremos el problema siguiendo un hilo conductor histórico, desde los presocráticos hasta las discusiones actuales. Plantearemos en un nivel general -en parte, superficial- los aspectos salientes de cada periodo e indagaremos en algunas posiciones discutidas en la actual filosofía de la química.

2. El concepto de 'elemento' en la Grecia clásica: de Tales de Mileto a Epicuro

El término 'elemento' puede entenderse en diversos sentidos, según el sistema filosófico que lo incorpore. Las primeras reflexiones acerca de la naturaleza surgieron en la filosofía

jónica en el siglo V a. C. La cuestión del *principio de todas las cosas* fue el problema central de la filosofía presocrática, a partir del cual se bosquejaron diversas posturas. Se considera que con Tales de Mileto (hacia 639-547 a. C.) comenzó la filosofía de la *physis*, término griego que significa “naturaleza” en el sentido originario de realidad primera y fundamental (Colli, 2009).

Una primera tentativa de solución apareció en la dupla conceptual de materia y forma. Los principales filósofos milesios veían en la materia el fundamento primero del mundo. Tales de Mileto fue el primero en afirmar la existencia de un único principio originario de todas las cosas: el agua. Consideraba que este principio natural era el unificador de todos los procesos materiales del mundo. Anaximandro (hacia 610-546 a. C.), uno de sus discípulos, sustituyó el agua por una idea más abstracta, el *ápeiron*, que denotaba ‘aquello que carece de límites’. Otro pensador de la misma escuela, Anaxímenes (hacia 590-528 a. C.), propuso al aire, al cual le asignó las propiedades del *ápeiron* por poseer infinitud y movimiento perpetuo.

Por su parte, durante aproximadamente el mismo período, la llamada escuela pitagórica se centró en la forma. Los pitagóricos sostuvieron que los principios de la matemática eran, a su vez, los principios de la naturaleza. Dado que en la matemática los números son los principios iniciales, consideraban que los mismos eran los elementos primigenios de todo lo existente.

Otro aporte relevante de la época fue el de Heráclito de Éfeso (hacia 544-484 a. C.), para quien el devenir, el permanente cambio, era un principio más fundamental que la materia y la forma. Heráclito identificó al fuego como el elemento que ocupaba el lugar de principio de la naturaleza, ya que podía explicar el incesante devenir del mundo con su extrema movilidad. Sin embargo, puede decirse que en su doctrina el fuego pierde su carácter corpóreo y pasa a concebirse como un principio activo, inteligente y creador (Colli, 2009).

A Heráclito se lo suele contraponer conceptualmente a Parménides (hacia siglo V a.C.), perteneciente a la escuela de Elea. Parménides fue un gran innovador: gracias a él se produjo un profundo cambio conceptual con el surgimiento de la *ontología* o ‘teoría del Ser’. Para el epistemólogo Karl Popper (1999), fue el primer filósofo que construyó un sistema deductivo, lo cual hizo posible el posterior reconocimiento, por parte de Leucipo y Demócrito, de que una teoría deductiva del mundo (como la creada por Parménides) sólo podría ser hipotético-deductiva.

Las líneas de pensamiento mencionadas anteriormente tuvieron en común la idea de un único principio generador de todas las cosas. El surgimiento de la *doctrina de los cuatro elementos*, formulada por Empédocles de Agrigento (hacia 490-432 a. C.), significó un cambio al respecto. Esta doctrina, que tuvo una gran influencia durante los siglos posteriores, sostenía que los elementos primigenios eran cuatro: fuego, aire, agua y tierra, y que a partir de sus combinaciones en diferentes proporciones se formaban las sustancias complejas y cambiantes que hay en el mundo (Colli, 2009).

Otra de las propuestas más radicalmente innovadoras fue la *doctrina atomista*, propuesta por Leucipo (hacia siglo IV a. C.) y desarrollada por su principal discípulo, Demócrito de Abdera (hacia 460-370 a.C.). Para el atomismo, los principios fundamentales eran unos corpúsculos diminutos denominados 'átomos', entidades consideradas indivisibles, eternas y de la misma naturaleza, aunque diferentes entre sí en magnitud y forma. Esta doctrina consideraba que existía una distinción fundamental entre la división matemática y la división física. La primera no tenía correspondencia en la realidad material y, en principio, era proseguible hasta el infinito. En cambio, la segunda estaba condicionada por la naturaleza de la materia a dividir, proceso que podía proseguir solamente hasta cierto límite. A partir de la limitación para dividir los cuerpos materiales se llegaba a una entidad *limitante*, que era el átomo. Demócrito también apeló, si bien de forma accesoria, al concepto de vacío y a la idea de movimiento eterno.

Los atomistas estaban de acuerdo con el principio fundamental de la escuela de Elea, según el cual 'sólo el ser es', e intentaron llevar este principio teórico a la experiencia sensible. Para la percepción humana, las cosas son diferentes (en figura, forma, color, etc.), pero sin embargo, están compuestas únicamente de átomos. La teoría atómica no sólo fue importante como explicación de los fenómenos de la experiencia sino que también permitió establecer el principio metodológico según el cual una teoría o explicación deductiva debe 'salvar las apariencias', esto es, ser concordante con la experiencia (Popper, 1963, p.112).

En el siglo IV a .C, tanto Platón (hacia 427-347 a. C.) como Aristóteles (hacia 384-322 a. C.) incorporaron en su sistema filosófico la doctrina de los cuatro elementos. Para Platón, la naturaleza podía explicarse mediante la *doctrina de los triángulos*. Como figuras bidimensionales, los triángulos son incorpóreos. Pero si se los combina adecuadamente, pueden formar cuerpos tridimensionales regulares o *sólidos platónicos*. Platón asimiló la doctrina de los cuatro elementos, pero otorgándole a cada uno de ellos un sustrato geométrico (ver Figura 1).

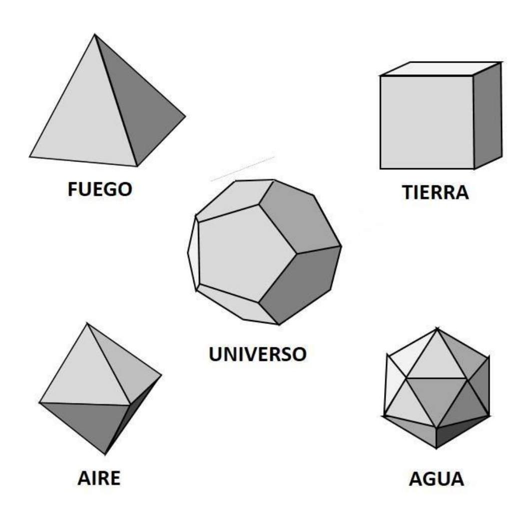


Figura 1. Los cinco sólidos platónicos

Aristóteles fue un agudo crítico de Demócrito. A él se debe la primera elaboración del concepto de *materia* (*hyle*). A diferencia del atomismo, rescató las cualidades materiales según la realidad experimentada o tangible. Fue también el primero en ver claramente la distinción entre una *mezcla* (*synthesis*) y lo que sería más tarde denominado un *compuesto químico* (*mixis*). Es precisamente en este punto, según Aristóteles, donde el atomismo fallaba por no poder dar cuenta de que las cualidades del nuevo material compuesto (*mixis*) no son la sumatoria de las cualidades de los materiales originales.

Aristóteles también planteó el problema de la divisibilidad de la materia. Propuso que existía una diferencia cualitativa entre las partículas más pequeñas de un material y las de otro, fenómeno al que denominó *minima naturalia* y que puede entenderse como la mínima parte en la que cada sustancia natural homogénea podía dividirse y conservar su carácter esencial. Este supuesto desempeñó un importante papel durante siglos, incluso más allá de la Edad Media. En esa noción es posible reconocer tanto el origen de las moléculas de la química moderna como la distinción entre *átomo* y *molécula*, sin lugar en el atomismo griego (Ströker, 1968).

En relación a su adopción de la doctrina de los cuatro elementos, Aristóteles consideraba que existía una única materia primera, la cual recibe su apariencia perceptible por las cuatro cualidades: caliente, frío, húmedo y seco. Estas cualidades se combinaban de dos en dos para dar lugar a los cuatro elementos. Así, cada elemento tenía una cualidad común y otra distinta respecto de los otros elementos, haciendo posible la transformación de un elemento en otro (ver Figura 2).

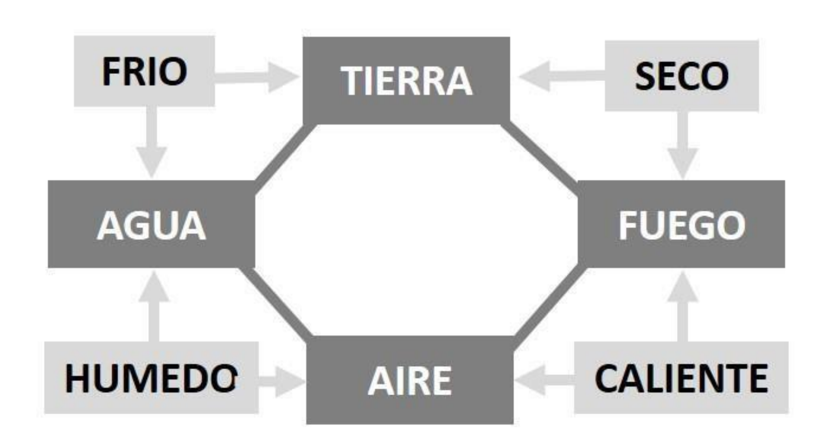


Figura 2. Los cuatro elementos y las cualidades aristotélicas

La ontología atomista fue retomada por Epicuro (hacia 340-270 a. C.) para expresar los fundamentos de una visión materialista de la naturaleza. La concepción del átomo de Epicuro era diferente a la de los presocráticos, dado que les asignó peso, además de figura y tamaño. También postuló la existencia de un movimiento de caída debido al peso de los átomos. Para explicar por qué los átomos no caían en trayectorias paralelas hasta el infinito, postuló la *teoría de la declinación de los átomos*, según la cual los átomos podían desviarse en cualquier momento y en cualquier punto respecto de la línea recta (Reale y Antisiere, 1988).

3. Átomos y elementos durante la Edad Media y el Renacimiento

Durante la Edad Media (siglos V a XV), el pensamiento occidental estuvo dominado por la Iglesia Católica, institución que adoptó de un modo prácticamente unánime una posición de rechazo hacia el atomismo. La aversión respecto de entidades indivisibles y de la idea de una sustancia primordial única de la cual derivaría el conjunto del mundo material fue expresada claramente por San Agustín (354-430), cuyas posturas fueron de mucho peso en el establecimiento y la evolución de la doctrina cristiana. La materialidad

del alma, inferida en la concepción atomista, era inaceptable para la Iglesia. Sin embargo, entre los cristianos medievales también hubo partidarios de la teoría atómica. El más importante fue Guillermo de Ockham (1285-1347). Para Ockham, la sustancia se reducía a la extensión y las cualidades por medio de las cuales la percibimos resultaban únicamente de las diversas combinaciones de los componentes o *partes elementales* de la materia. Estas partes elementales eran, básicamente, los átomos postulados por Demócrito y Epicuro (Pullman, 1995).

Durante el comienzo del período renacentista en los siglos XV y XVI se produjo una clara revitalización del atomismo. El aporte más transcendente lo brindó el sacerdote, filósofo y científico Pierre Gassendi (1592-1655), quien propuso una versión del atomismo conciliada con los dogmas cristianos. Del atomismo griego eliminó el materialismo (que excluía a la creación divina) y el mecanicismo (que negaba la finalidad de la naturaleza). Pero conservó lo esencial de la doctrina epicúrea: las nociones de *átomo* y de *vacío*. En su propuesta, los átomos, que eran indivisibles, invisibles y diferentes en peso y tamaño, fueron creados por Dios en un número desmesurado, pero no infinito. Los átomos se podían desplazar por el vacío, donde chocaban entre sí, dando lugar a la formación de los cuerpos. Para Gassendi, estos choques no eran azarosos sino dirigidos por la voluntad divina (Reale y Antisiere, 1988).

También en el período renacentista se produjo en Europa el surgimiento de la *iatroquímica*, una práctica con claros vestigios medievales y con una importante influencia alquímica. Fue fundada por Paracelso (1493-1541), quien introdujo una nueva concepción de la materia. Paracelso mantuvo los cuatro elementos aristotélicos, pero los despojó de su carácter de portadores de propiedades, otorgándoselo a una materia primera: el *misterium magnum* (Brock, 1998). Dado que consideraba que los cuatro elementos eran inexistentes en la naturaleza, les concibió un carácter meramente espiritual, una especie de madres de los objetos. A los cuatro elementos, Paracelso agregó los tres elementos alquímicos: azufre, mercurio y sal, a partir de los cuales propuso la llamada *doctrina de los 'tria prima'* o tres principios. Estos principios eran cualidades universales que se depositaban en los cuatro elementos (tomados como receptáculos) y que le conferían la forma y las propiedades características a cada sustancia (Brock, 1998).

Una de las críticas más profundas tanto a la doctrina de los *tria prima* como a la teoría de los cuatro elementos fue elaborada por Robert Boyle (1627-1691). En su obra cumbe de 1661, *El Químico Escéptico*, se pronunció en contra de las ideas de la preexistencia de

una forma y de los grupos de cualidades como agentes responsables de las propiedades de cada una de las sustancias de la naturaleza. En su lugar, propuso que muchos de los cuerpos que tomamos como elementos no son tales, sino que son compuestos o *cuerpos mixtos* (Brock, 1998).

El principal aporte de Boyle a la noción de elemento fue la propuesta de la teoría corpuscular, según la cual los corpúsculos eran los componentes últimos de los cuerpos. Boyle, quien además de químico era un filósofo mecanicista, encontraba la explicación final de los fenómenos naturales en principios mecánicos. Según su perspectiva, las partículas constituyentes de los cuerpos eran susceptibles de ser tratadas mecánicamente. Teniendo en cuenta la manera en que las partículas de los distintos cuerpos deberían estar dispuestas para poder reaccionar entre sí, llegó a la conclusión que los corpúsculos deberían estar en continuo movimiento. Postuló también que la intensidad del movimiento debería ir en aumento con la temperatura. Para Boyle las características mecánicas de los corpúsculos eran fundamentales, pero el comportamiento de los cuerpos no podía ser justificado solamente apelando a las particularidades mecánicas. Lo esencial eran las interacciones de los corpúsculos, siendo los fenómenos químicos los resultados de esas interacciones (Pullman, 1995).

4. La teoría del flogisto y la definición operacional de elemento de Lavoisier

La *teoría del flogisto* fue esencialmente una teoría de los elementos propuesta por el médico y químico Georg Stahl (1660-1734). Esta teoría buscó explicar los fenómenos caloríficos involucrados en los procesos de combustión y calcinación de los metales. Stahl propuso la existencia de tres tipos de tierra: la *terra fluida*, o tierra de mercurio, que le proporcionaba a las sustancias fluidez y volatilidad; la *terra lapídea* o tierra vítrea, donde residía el principio de fusibilidad, y la *terra pinguis* o tierra crasa, portadora carácter oleoso y combustible (Brock, 1998).

Una razón que favoreció la consolidación de la teoría del flogisto fue que los desarrollos teóricos de Boyle no resultaban de gran ayuda para los químicos prácticos de la época, dedicados a las incipientes industrias del vidrio, cerámica, textil y alimentaria. Por tal motivo, se retomó la teoría de los cuatro elementos, con la diferencia de que los químicos comenzaron a distinguir las teorías físicas de la materia de las teorías químicas, y aceptaron que, a los propósitos prácticos, las sustancias que no podían ser

posteriormente refinadas por medio del fuego (o de cualquier otro método analítico de separación) eran efectivamente *elementos químicos*. Esto no excluía la posibilidad de que estos *elementos* estuvieran, a su vez, compuestos por unidades físicas de materia más pequeñas, como una determinada clase de corpúsculos, pero se trataba de una posibilidad incierta y que, a los fines prácticos, podría obviarse.

Según la teoría del flogisto, la materia estaba constituida por corpúsculos (de manera similar a la propuesta de Boyle), que al unirse formaban los compuestos. Stahl suponía que había cuatro tipos básicos de corpúsculos, que tenían correspondencia con las tres *tierras* de Becher y con el agua. En la teoría del flogisto se suponía que los tipos básicos de corpúsculos se unían entre sí formando unos compuestos muy estables, llamados *principios secundarios*, que cuando se combinaban entre ellos, producían los llamados *cuerpos mixtos*. También se consideraba que todas las sustancias con propiedades inflamables contenían la *terra pinguis* o flogisto. El flogisto estaba presente en todas las sustancias combustibles y se transformaba por el calor; se desprendía en la calcinación de los metales y en la combustión de la materia orgánica; también en procesos como la respiración, la fermentación y la putrefacción. En la combustión, el flogisto se desprendía del cuerpo hacia la atmósfera. Si mediante calentamiento se le agregaba flogisto al producto resultante, se obtenía nuevamente el compuesto de partida. De esta manera, Stahl propuso que el proceso debía ser reversible. Con esta teoría se podía dar cuenta de observaciones empíricas en los procesos metalúrgicos, como la calcinación de los metales, que producían como resultado las entonces llamadas *cales* (Esteban Santos, 2001).

Antoine Laurent de Lavoisier (1743-1792), considerado por muchos el padre de la química moderna, en el discurso preliminar de su *Tratado Elemental de Química* publicado en 1789, expresó: *"...ligamos al nombre de elementos o de principios de los cuerpos la idea del último término al que se llega mediante el análisis, todas las sustancias que no hemos conseguido descomponer mediante método alguno constituyen elementos para nosotros"* (Lavoisier, 2007, p. 61). Se considera que esta definición de *elemento*, de carácter operacional, es la primera de la química moderna. En ella se encuentra resaltado el rol de la experimentación para la conceptualización de los elementos químicos, al punto de supeditar la condición de elementos a la posibilidad de aislarlos mediante operaciones de laboratorio. Además, queda de manifiesto un profundo rechazo a toda consideración metafísica (Stengers, 1989). También resulta destacable que

el concepto de elemento fue concebido de manera provisional y subordinado al poder de las técnicas de análisis. Esta definición de tipo operacional aún puede encontrarse en muchos libros de texto universitarios de amplia difusión (Bensaude-Vincent, 1989a).

5. Discusiones sobre la hipótesis atómica durante el siglo XIX: de Dalton al congreso de Karlsruhe

A principios de siglo XIX, el químico John Dalton (1766-1844) propuso la aplicación de la teoría atómica a los elementos químicos, gracias a lo cual pudo formular una hipótesis compatible con las determinaciones experimentales cuantitativas de sustancias químicas que se llevaban a cabo en la época. La principal contribución de Dalton consistió en formular una solución a un problema teórico conocido como *transducción*. La misma consistió en idear una manera de calcular los pesos relativos de las partículas últimas de la materia, a partir de mediciones que podían ser realizadas en el laboratorio. Ese cálculo de medición química implicó poder considerar a los átomos como objetos concretos de la realidad tangible. Asimismo, interpretó a las reacciones químicas como reorganizaciones o reagrupaciones de átomos contenidos en moléculas, sin que los átomos sufran ninguna alteración durante la reacción. Es posible ilustrar la posición del atomismo propuesto por Dalton a partir de cuatro premisas fundamentales:

1. Toda la materia está compuesta por átomos sólidos, indivisibles e incomprensibles.

2. Los átomos son indestructibles, por lo que conservan su identidad en cualquier reacción química

3. Los átomos de cada elemento, son iguales entre sí, pero diferentes a los de los demás elementos.

4. Cuando los átomos se combinan lo hacen con una relación de números enteros y pequeños.

La teoría atómica de Dalton permitió que los conceptos de átomo y elemento se relacionaran estrechamente, de maneta que (en su versión original) cada elemento estaba formado por una cantidad enorme pero finita de átomos. Desarrollos posteriores mostraron que no todos los átomos eran iguales; revelaron que los átomos son entidades mucho más complejas que las inicialmente pensadas por Dalton y que la explicación de las relaciones entre los átomos para formar compuestos requería de una elaboración importante.

Además, la hipótesis atómica tuvo como efecto convertir en indiscutible el concepto de *proporción*, es decir, de combinación mediante unidades discretas, pero desplazó el debate hacia otro problema. ¿Cuál era la fórmula correcta? ¿Cuántos átomos había en un determinado compuesto? Estos y otros aspectos fueron temas arduamente debatidos durante el siglo XIX, si bien existía un acuerdo generalizado en la comunidad química de la época acerca de que la hipótesis atómica facilitaba una adecuada interpretación de los fenómenos químicos y constituía una relevante herramienta heurística para la enseñanza y la investigación (*cfr*., por ejemplo, Bensaude-Vincent y Stengers, 1997; Brock, 1998).

No obstante, el centro del debate giraba en torno a la jerarquía de los átomos como entidades reales, dado que la propuesta de Dalton no proporcionaba ninguna prueba de su existencia concreta. Varios contemporáneos de Dalton se cuidaron en establecer una clara distinción entre la creencia en una teoría metafísica de la materia constituida por átomos y la prueba experimental de la ley de las proporciones combinatorias. Aun así, resultaba evidente que para poder realizar explicaciones adecuadas era fundamental contar con datos precisos de los pesos atómicos.

En 1814, el químico Hyde Wollaston (1776-1826) propuso el término *peso equivalente* como alternativo al de *peso atómico*. De esa forma, se dejaba de lado la carga metafísica, pero se conservaba el poder heurístico de los átomos. También propuso un sistema de pesos equivalentes basado en el oxígeno, al que le otorgó un peso equivalente arbitrario de 100. Las escalas de pesos atómicos y pesos equivalentes eran compatibles y también traducibles entre sí (Brock, 1998).

El congreso mundial de química celebrado en la ciudad alemana de Karlsruhe en 1860 marcó un momento clave para la historia de la química y reunió a los químicos más relevantes de la época. En ese entonces reinaba una gran confusión y ambigüedad acerca de muchos aspectos de la disciplina, como la nomenclatura y la simbología empleadas. Tampoco se había alcanzado un acuerdo acerca de la escala de pesos atómicos que debían emplearse para los elementos más comunes como carbono, oxígeno, hidrógeno y nitrógeno, ni de las relaciones proporcionales entre los mismos (Brock, 1998).

Una de las consecuencias más importante de este congreso fue la revalorización de la olvidada hipótesis de Avogadro, retomada y defendida por el químico italiano Stanislao Cannizzaro (1826-1910) como una estrategia para ser aplicada en el cálculo de los pesos atómicos y moleculares. Se acordó también adoptar el sistema de pesos

atómicos propuesto por Charles Gerhardt (1816-1856), lo que trajo aparejado una mayor claridad en la exposición de nuevos hechos e ideas. También se avanzó de manera notable en el establecimiento de una notación y nomenclatura uniforme para el lenguaje químico, tomando como base la propuesta original formulada por Jöns Jacob Berzelius (1776-1848).

Por otro lado, las disputas entono a la metafísica concerniente a la teoría atómica de Dalton fueron solamente resueltas a partir de los experimentos de Jean Perrin (1870-1942) a principios del siglo XX, quien determinó el número de Avogadro mediante trece procedimientos experimentales diferentes (Bensaude-Vincent y Stengers, 1997).

6. La naturaleza dual del concepto de 'elemento químico': de Mendeleev a Paneth

Dimitri Mendeleev (1834-1907) fue un destacado químico cuyo mayor aporte fue sin dudas el desarrollo del sistema periódico de los elementos químicos. Hacia el año 1868, consideró que carecía del material didáctico apropiado para dictar su curso de química universitaria, lo que lo llevó a buscar una manera de presentar de forma amena y clara lo más relevante del enorme conjunto de conocimientos químicos acumulado para entonces. La enseñanza de la disciplina en esa época consistía en relacionar las propiedades de los cuerpos compuestos con las propiedades de los cuerpos simples que los formaban. Mendeleev, en cambio, infirió que las propiedades de los cuerpos simples y los compuestos presentaban una función periódica que dependía de los pesos atómicos de los elementos. A partir de esta estrategia, supuso que las propiedades fenoménicas no eran otra cosa que manifestaciones exteriores de los elementos. De esa manera, propuso que los elementos tenían un estatus más fundamental, de naturaleza metafísica, cuyo único atributo era el peso atómico.

Mendeleev se ocupó de diferenciar claramente entre los *cuerpos simples* (o *sustancias simples*) y los *elementos*, adoptando de esa manera una posición dualista cuyas raíces pueden remontarse a la filosofía presocrática (Scerri, 2007). Un cuerpo simple tenía una naturaleza material, estaba dotado de propiedades físicas y era capaz de intervenir en las reacciones químicas. En cambio, el término *elemento químico* evocaba necesariamente una entidad de un carácter más fundamental, de mayor abstracción y de naturaleza metafísica, que poseía como propiedad esencial el peso atómico (Bensaude-

Vincent, 1989b). A partir de esta definición de elemento, Mendeleev articuló el sistema de clasificación periódica.

La concepción de los elementos como entidades teóricas permitió la predicción de nuevos elementos y facilitó cambios de posiciones que dieron armonía al sistema. Para esta concepción, el cuerpo simple por sí solo no tenía poder explicativo; quedaba, junto al compuesto, relegado al mundo de las apariencias. El elemento era el único principio explicativo y constituía el sustrato de todo lo observable. Los elementos eran *ese algo* que se conservaba en las reacciones químicas, que permanecía a pesar del cambio.

Posteriormente, con el descubrimiento de los isótopos en el año 1913, la comunidad científica tropezó con un grave problema, dado que a un mismo lugar de la tabla periódica le podían corresponder átomos de distinta masa. Como la tabla periódica se ordenaba mediante los pesos atómicos crecientes, era lícito discutir acerca de si estos átomos eran manifestaciones de un mismo elemento o si, o por el contrario, correspondían a elementos distintos. Durante la segunda década del siglo XX se descubrieron una gran cantidad de isótopos. De pronto, los elementos parecían multiplicarse de una manera acelerada, lo que provocó una crisis profunda en el sistema periódico a raíz de la clasificación problemática de los isótopos en la tabla periódica.

En 1916 el radio-químico Friedrich Paneth (1887-1958) se refirió críticamente a la llamada *ley de la sustancia*. Esta ley señalaba que, si dos sustancias eran idénticas en algunas de sus propiedades fundamentales, lo eran también en todas sus propiedades. Paneth negó explícitamente la validez de esa expresión, considerando que tras el descubrimiento de la isotopía era imposible sostenerla. Sugirió que las dificultades mencionadas podían superarse si en lugar de exigir la identidad de todas las propiedades para designar dos elementos con el mismo nombre, solamente se tomaba en cuenta la igualdad de las propiedades químicas. Luego, Paneth no consideró al peso atómico como una propiedad y elaboró la siguiente definición: *"Dos elementos se denominan el mismo si, una vez mezclados, no se los puede separar por medios químicos"* (Paneth, 1916, citado en Ruthenberg, 2009, p.82).

Adicionalmente, junto al físicoquímico George Hevesy, Paneth logró evidenciar experimentalmente que los diferentes isótopos de un mismo elemento tenían propiedades químicas similares y que sólo podrían separarse por medios físicos. En consecuencia, el descubrimiento de nuevos isótopos correspondía a los elementos concebidos como *sustancia simple* y no como *sustancia básica* en la caracterización de Mendeleev, lo cual

fue puntualmente señalado por el propio Paneth (Scerri, 2007). Su propuesta influyó en la nueva definición oficial del concepto de elemento suministrada por la IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*) en 1923, la cual permitió identificar unívocamente un elemento de acuerdo con su número atómico (Kragh, 2000; Holden, 2004).

Posteriormente, en 1931, Paneth elaboró su propia interpretación dualista de la noción de elemento. En su propuesta marcó claramente la diferencia entre las dos concepciones tradicionales de elemento: la de sustancia simple (el elemento como entidad meramente empírica, como magnitud observable) y la de sustancia básica (el elemento como *aquello* más allá de la observación, que es indestructible en los compuestos, se conserva a través del cambio y es independiente de las transformaciones químicas). En concordancia con Mendeleev, subrayó que el sentido fundamental de la noción de elemento era la de su manifestación como sustancia básica, de índole abstracta, metafísica, que le posibilitaría al elemento químico eventualmente poder regresar al estado original tras una sucesión de reacciones (Paneth, 1931). En efecto, la recomendación de Paneth para el mantenimiento de la tabla periódica se basó en otorgar prioridad conceptual al ordenamiento de los elementos como sustancias básicas, recuperando de esa manera el sentido dual propuesto por Mendeleev. Si los químicos se hubieran centrado únicamente en las sustancias simples, se habrían visto obligados a reconocer nuevos elementos en cada nuevo isótopo descubierto.

7. Discusiones actuales en torno al concepto de 'elemento químico'

Entre las posiciones actuales, es posible categorizar los enfoques tomando como referencia la posición de Paneth y organizándolos en torno a ella. Entre los actuales filósofos de la química que abordan el problema de la naturaleza de los elementos desde una perspectiva basada en la distinción de Paneth, podemos mencionar a Eric Scerri, Joseph Earley y Klaus Ruthenberg.

Scerri (2005, 2007, 2012, 2019, entre otros) resalta las ventajas que presenta la distinción de Paneth para la comprensión, la caracterización y la clasificación de los elementos químicos. Desarrolla argumentos a través de los cuales clarifica y destaca la relevancia de la noción de sustancia básica para diversas problemáticas filosóficas. En 2012 y 2019, Scerri elaboró una crítica a fin de aclarar una confusión en la relación entre los conceptos de sustancia básica, sustancia simple y elemento, e introdujo el término

sustancia simple combinada. Para Scerri, si bien el sistema periódico se ordena a partir de los elementos concebidos como sustancias básicas, incluye además a las sustancias simples, que también muestran periodicidad (reactividad química, propiedades físicas, etc.). La insistencia de Paneth acerca de que el sistema periódico sólo clasifica a las sustancias básicas, según Scerri, invita a la pregunta: *"¿Qué información podemos aprender de los elementos en sus manifestaciones como sustancia simple, considerando especialmente que se dice que no tienen propiedades?"* (Scerri, 2012, p.71). Si bien el número atómico proporciona un criterio para ordenar los elementos y, a partir de ese orden, articular la clasificación periódica, la misma también da cuenta de las similitudes que las distintas sustancias muestran en sus manifestaciones macroscópicas como sustancias simples. La introducción del término *sustancia simple combinada*, considera Scerri, contribuye a superar esa dificultad, al tiempo que también aclara el alcance de la noción de los elementos como *sustancia básica*.

Por su parte, Earley (2009, 2019) considera que existen algunas ambigüedades en la distinción de Paneth, debidas principalmente a problemas en la traducción. El trabajo original de Paneth fue escrito en alemán y la traducción al inglés fue realizada por su hijo, Fritz Paneth, quien tradujo los términos *einfacher stoff* y *grundstoff* del original, como *simple substance* y *basic substance*, respectivamente. Earley analiza el sentido original del término utilizado por Paneth para la sustancia básica, considerando que el término *grundstoff* en alemán no significa una sustancia en sentido metafísico estricto, sino que remite a una idea que implica un cierto tipo de materialidad, aspecto que no se refleja en la traducción *basic substance* del inglés. Así, fundamenta su posición mediante un estudio acerca de la influencia de la gramática latina en los idiomas alemán e inglés. Earley argumenta que, para poder hablar de *sustancia*, es necesario que se cumplan dos requisitos: a) estabilidad en el tiempo (por breve que sea), y b) existencia independiente. Para este autor, los elementos químicos en los compuestos no cumplen ninguno de estos dos requisitos, y ejemplifica su postura afirmando que *"El carbono en el tetracloruro de carbono no persiste como carbono, ni existe como tal"* (Earley, 2009, p. 68). También considera que las dificultades conceptuales resultan, en gran medida, de la polisemia existente. Por ello, sugiere elucidar el problema mediante una clara diferenciación lingüística.

Otro estudio que aborda la problemática de la naturaleza de los elementos químicos fue el realizado por Ruthenberg (2009), en el marco de un análisis de la

influencia de la filosofía kantiana en la obra de Paneth. El autor considera que Kant construyó una epistemología dualista que puede ajustarse a las particularidades de la química de manera exitosa. Ruthenberg resalta que la distinción entre sustancia simple y sustancia básica puede ser expresada en los términos de una relación entre los mundos empírico y trascendental.

Entre filósofos de la química contemporáneos que plantean posiciones divergentes con la naturaleza dual del concepto de elemento, podemos nombrar a Robin Hendry, Paul Needham, Rein Vihalemm y Eugen Schwarz. Estos autores, en líneas generales, niegan cualquier sentido metafísico a los elementos y proponen superar las dificultades encontradas mediante una nueva perspectiva conceptual.

Hendry (2005, 2006, 2019) considera que existe una continuidad conceptual en el término *elemento*, que perdura desde finales del siglo XVIII a la actualidad, pese a los cambios en los fundamentos teóricos de la química. Esta continuidad, según Hendry, se deriva de la presencia constante de tres hipótesis que hacen de los elementos los componentes básicos de la química: 1) sobreviven al cambio químico, 2) todos los compuestos están formados por ellos, y 3) la composición elemental de un compuesto explica su comportamiento. Estos tres supuestos conforman *la concepción central* de elemento químico y permiten la continuidad referencial en los nombres de los elementos individuales.

Hendry desarrolla una crítica a la distinción entre sustancia básica y sustancia simple de Paneth desde varios ángulos. Considera innecesaria una apelación al mundo de lo trascendental para dar cuenta de la permanencia de los elementos en los compuestos. El autor reconoce que la noción de sustancia básica es más abstracta que la de sustancia simple, pero la diferencia no radicaría en la distinción metafísica entre lo abstracto y lo concreto, sino en las diferencias de niveles de abstracción propias del campo de la lógica y la teoría de conjuntos. Expresa que mediante la consideración de las propiedades microestructurales de los elementos, es posible encontrar la conexión entre las propiedades observables de los elementos y las propiedades particulares de los compuestos. Hendry propone una distinción conceptual entre *elemento libre* -que denota los elementos que no están combinados con ningún otro- y *elemento* -que indica cualquier estado particular de combinación química-. Entre el elemento libre y el elemento, para el autor, existe una relación lógica de inclusión.

En tanto, Vihalemm (2011) también presenta una crítica a la apelación a la metafísica para dar cuenta del comportamiento de los elementos como sustancias básicas y apoya la denominación propuesta por Hendry para denotar los elementos químicos. Vihalemm sostiene que apelar a la metafísica no explica realmente nada, ni en las ciencias ni en la filosofía de la ciencia. Considera que la cuestión de si los elementos químicos son clases naturales debe ser analizada en términos filosóficos sin recurrir a la metafísica. Según este autor, los elementos químicos constituyen clases naturales ya que fueron identificados a través de un procedimiento de idealización científica, como especies teóricas.

Por su parte, Needham (2006) propone dar cuenta de la naturaleza de los elementos mediante una adaptación de las doctrinas aristotélicas a la problemática actual de la química. Toda sustancia química es una manifestación macroscópica de las propiedades de sus elementos constitutivos, pero ninguna parte de la sustancia tiene las propiedades necesarias para poder ser considerada un elemento. De eso no se desprende que el elemento *ha dejado de existir*, sino que los elementos están presentes *en potencia* en la sustancia. De acuerdo con la concepción aristotélica, la noción de elemento se caracteriza sobre la base de las propiedades que determinan cómo reaccionan las sustancias entre sí para generar nuevas sustancias. Estas propiedades se presentan en grados variables y pueden reducirse a los pares de magnitudes primarias: calor y humedad (véase Fig. X2). Las sustancias, en general, se pueden caracterizar por las propiedades que confieren el poder activo de afectar a otras y por la susceptibilidad de ser afectadas mediante las propiedades derivadas de las cualidades primarias. Los elementos se distinguen entre sí por el hecho de que adquieren valores extremos o limitantes de esas cualidades subyacentes.

Finalmente, Schwarz (2007) sostiene que la falta de claridad de ciertos conceptos químicos, como el de elemento, es uno de los principales problemas irresueltos para una adecuada explicación del sistema periódico. Considera que los químicos y los filósofos de la química utilizan el término *elemento químico* con tres significados diferentes: elemento químico *básico*, elemento *metalúrgico simple* y elemento *astrofísico* (o *átomo elemental*). Además, indica las propiedades de los elementos químicos que deben tenerse en cuenta para una adecuada caracterización.

8. Consideraciones finales

En este trabajo realizamos un recorrido histórico en torno al concepto de 'elemento químico'. Hemos visto que una posibilidad es caracterizarlo como aquella sustancia que no puede descomponerse en otras más sencillas utilizando medios químicos. Esta definición de corte operacional es la que propuso Lavoisier en el siglo XVIII, la cual resalta la noción de elemento como *sustancia simple*. Pero existe otra noción del concepto de elemento, en un sentido metafísico, cuyas raíces se remontan a los filósofos presocráticos. Esta idea pasó a Aristóteles mediante su doctrina de los cuatro elementos y se instaló en el pensamiento occidental con la preeminencia de la filosofía aristotélica hasta la modernidad.

A finales del siglo XIX, Mendeleev enfatizó la naturaleza dual del concepto de elemento. A los elementos concebidos en un sentido metafísico los denominó elementos abstractos o reales, los cuales tenían un estatus más fundamental que los elementos concebidos como sustancias simples. Para Mendeleev, los elementos como sustancias abstractas carecían de propiedades y solo representaban la forma que los elementos tomaban cuando se presentaban en compuestos. Además, sostuvo que los elementos reales tenían como único atributo su peso atómico.

El descubrimiento de los isótopos fue otro paso clave para la comprensión de la naturaleza de los elementos. La gran cantidad de isótopos de muchos elementos descubiertos provocó la llamada *crisis de los isótopos*. Frente a esta situación, Paneth sostuvo que la tabla periódica podía preservarse, considerando que las propiedades químicas de los isótopos de un mismo elemento eran indistinguibles. De este modo, el descubrimiento de nuevos isótopos representó nuevas manifestaciones de un elemento como sustancia simple y no como sustancia básica. Su argumento filosófico estaba basado en retomar la naturaleza dual del concepto de elemento de Mendeleev.

Desde la década de 1990 hasta la actualidad, varios químicos y filósofos retomaron la reflexión acerca de la naturaleza del concepto de elemento. El devenir de las discusiones mostró la complejidad intrínseca del concepto y el desacuerdo existente. Se han rescatado trabajos y reflexiones de variados periodos históricos y, en algún sentido, todos los aportes realizados desde la filosofía presocrática cobraron actualidad. Por tal motivo, creemos oportuno cerrar este trabajo con la última estrofa del poema "La noche cíclica" de Borges, cuya primera estrofa empleamos como epígrafe:

...Vuelve la noche cóncava que descifró Anaxágoras;

vuelve a mi carne humana la eternidad constante

y el recuerdo ¿el proyecto? de un poema incesante:

«Lo supieron los arduos alumnos de Pitágoras...»

Referencias bibliográficas

Bensaude-Vincent, B. (1989a). "Lavoisier: una revolución científica". En: Serres, M. (ed.). *Historia de las ciencias*. Madrid: Ediciones Cátedra, pp. 411-435.

Bensaude-Vincent, B. (1989b). "Mendeleiev: historia de un descubrimiento". En: Serres, M. (ed.). *Historia de las ciencias*. Madrid: Ediciones Cátedra, pp. 503-525.

Bensaude-Vincent, B. y Stengers, I. (1997). *Historia de la Química*. Madrid: Addison Wesley - Universidad Autónoma de Madrid.

Brock, W. (1998). *Historia de la Química*. Madrid: Alianza.

Colli, G. (2009). *La naturaleza ama esconderse*. México: Consejo Nacional para la Cultura y las Artes / Editorial Sexto Piso.

Earley, J. (2009). "How chemistry shifts horizons: element, substance, and the essential". *Foundations of Chemistry* 11: 65-77.

Earley, J. (2019). "Origins of the Ambiguity of the Current Definition of Chemical Element". En: Scerri, E. y Ghibaudi, E. (eds). *What Is A Chemical Element?* New York: Oxford University Press, pp. 109-123.

Esteban Santos, S. (2001). *Historia de la Química*. Madrid: UNED.

Hendry, R. (2005). "Lavoisier and Mendeleev on the elements". *Foundations of Chemistry* 7: 31-48.

Hendry, R. (2006). "Elements, compounds and other chemical kinds". *Philosophy of Science* 73: 864-875.

Hendry, R. (2019). "The Existence of Elements, and the Elements of Existence". En: Scerri, E. y Ghibaudi, E. (eds). *What Is A Chemical Element?* New York: Oxford University Press, pp. 124-142.

Holden, N. (2004). "Atomic weights and the international committee – A historical review", *Chemistry International* 26: 4-7.

Kragh, H. (2000). "Conceptual changes in chemistry: The notion of a chemical element, ca. 1900–1925". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics B* 31: 435-450.

Lavoisier, A. (2007). *Tratado Elemental de Química*. Barcelona: Crítica.

Needham, P. (2006). "Aristotle`s theory of chemical reaction and chemical substances". En: Baird *et al*. (eds.). *Philosophy of Chemistry. Synthesis of a New Discipline*, Dordrecht: Springer, pp. 43-67.

Paneth, F. A. (1931). "The epistemological status of the concept of element", [reimpreso en *Foundations of Chemistry* 5: 113-145 (2003)].

Popper K. (1963). *Conjeturas y refutaciones*. Barcelona: Paidós.

Popper K. (1999). *El mundo de Parménides. Ensayos sobre la ilustración presocrática*. Barcelona: Paidós.

Pullman, B. (1995). *El átomo en la historia de la humanidad*. Barcelona: Biblioteca Buridán.

Reale, G. y Antisieri, D. (1988). *Historia del pensamiento filosófico y científico*. Barcelona: Herder.
Ruthenberg, K. (2009). "Paneth, Kant and the philosophy of chemistry". *Foundations of Chemistry* 11: 79-91.
Scerri, E. R. (2005). "Some aspects of the metaphysics of chemistry and the nature of the elements". *Hyle – International Journal for Philosophy of Chemistry* 11: 127-145.
Scerri, E. R. (2007). *The Periodic Table – Its story and its significance*. New York: Oxford University Press.
Scerri, E. R. (2012). "What is an element? What is the periodic table? And what does quantum mechanics contribute to the question?". *Foundations of Chemistry* 14: 69-81.
Scerri, E. R. (2019). "The Many Questions Raised by the Dual Concept of "Element". En: Scerri, E. y Ghibaudi, E. (eds). *What Is A Chemical Element?*, New York: Oxford University Press, pp. 5-31.
Schwarz, W. H. E. (2007). "Recommended questions on the roads towards a scientific explanation of the periodic system of the chemical elements with the help of the concepts of quantum physics". *Foundations of Chemistry* 9: 139-188.
Stengers, I. (1989). "La afinidad ambigua: el sueño newtoniano de la química del siglo XVIII". En M. Serres (ed.). *Historia de las ciencias*, Madrid: Ediciones Cátedra, pp. 337-361.
Ströker, E. (1968). "Element and compound. on the scientific history of two fundamental chemical concepts". *Angewandte Chemie International Edition* 7: 718-724.
Vihalemm, R. (2011). "The Autonomy of Chemistry: Old and New Problems". *Foundations of Chemistry* 13: 97-107.

CAPÍTULO 3

Problemas en la tabla periódica de los elementos

Martín Labarca

CONICET – Universidad de Buenos Aires

1. Introducción

La Asamblea General de las Naciones Unidas y la UNESCO proclamaron a 2019 'Año Internacional de la Tabla Periódica de los Elementos Químicos', en el que se conmemoraba el 150 aniversario de la primera tabla periódica publicada por Dmitri Ivanovich Mendeleev (1834–1907). Dicha tabla tuvo un profundo impacto en la comunidad científica y representó el punto de mayor madurez respecto de la noción de periodicidad química. Los primeros indicios de dicha noción se deben a Johann Döbereiner, quien en 1817 comenzaba a encontrar relaciones en algunos grupos de tres elementos, hasta que en la década de 1860 distintos sistemas periódicos fueron propuestos por de Chancourtois, Newlands, Odling, Hinrichs y Lothar Meyer.

El sistema periódico publicado por Mendeleev en 1869 contenía 66 elementos desplegados en 8 grupos y 12 filas. El químico ruso dejó espacios para elementos que no habían sido aislados aún y predijo exitosamente varias de sus propiedades (especialmente en los casos del galio, germanio y escandio). A partir de allí, junto con los nuevos elementos químicos (naturales y artificiales), centenares de tablas periódicas han sido (y continúan siendo) desarrolladas en diferentes formatos. El ordenamiento actual de los 118 elementos en la tabla periódica moderna muestra de forma notable como ciertas propiedades se repiten luego de intervalos regulares. Asimismo, la tabla condensa información sobre los elementos permitiendo comprender como reaccionan entre sí.

Con la activa participación de químicos, físicos, historiadores y filósofos de la química y, en algunos casos, de científicos amateurs, varios son los tópicos en debate, a saber: ¿Hay una mejor forma de presentar los elementos en el sistema periódico? ¿Puede la tabla periódica ser reducida a la mecánica cuántica? ¿Cuáles son las posiciones

adecuadas para el hidrógeno y el helio? ¿Qué elementos deben formar el grupo 3? ¿Cuál es el papel de las tríadas de número atómico? ¿Cuál es el estatus de la ley periódica? A continuación, presentaremos el estado de los debates sobre estos temas.

2. El problema de la forma óptima

A poco más de 140 años de la publicación de la primera tabla periódica de Mendeleev, más de mil variantes de la misma han sido publicadas en distintos formatos.[1] La forma de la tabla periódica es aún hoy objeto de interminables debates en el plano epistemológico. El punto central consiste en si existe una mejor manera de ubicar los elementos o, en otras palabras, si es posible una mejor representación de la periodicidad química.

Algunos investigadores afirman que es inútil tratar de encontrar una única representación de los elementos que dé cuenta de todas las relaciones importantes entre ellos (*cfr.* Mazurs, 1974; Stewart, 2005; Rich y Laing, 2011). Este punto de vista instrumentalista fue desafiado durante varios años por Eric Scerri (2007), quien defendió una posición realista, según la cual debe existir una mejor manera de ordenar los elementos en grupos de columnas, y es tarea de los filósofos de la química tratar de encontrar dicha forma óptima. Naturalmente, esto implicaría que algunas representaciones del sistema periódico son superiores a otras. Algún tiempo después, Scerri (2014) abandonó finalmente la insistencia en dicha idea. En este punto surge una pregunta clave: ¿Cuál es la posición de la IUPAC con relación a los múltiples diseños existentes de la tabla periódica? ¿Existe alguna recomendación sobre el tema? La opinión de la División de Representación de la Estructura y Nomenclatura Química es clara: la IUPAC reconoce que una sola tabla no se ajusta a todos los usos, por tanto, avala la proliferación de representaciones del sistema periódico. La tabla periódica como la conocemos hoy día (Figura 1) es un ícono a menudo asociado con la IUPAC, aunque erróneamente: ninguna forma específica de la tabla periódica ha sido aprobada por dicha institución (Leigh, 2009).

[1] En sentido estricto, 'sistema periódico' es la tesis según la cual existe una relación de naturaleza periódica entre los elementos químicos, mientras que 'tabla periódica' denota la representación del sistema periódico y de la ley periódica en dos dimensiones (aunque esta cuestión sigue abierta al debate). En este trabajo utilizaremos dichos conceptos en sentido amplio, tal como suelen emplearse en la literatura actual sobre el tema.

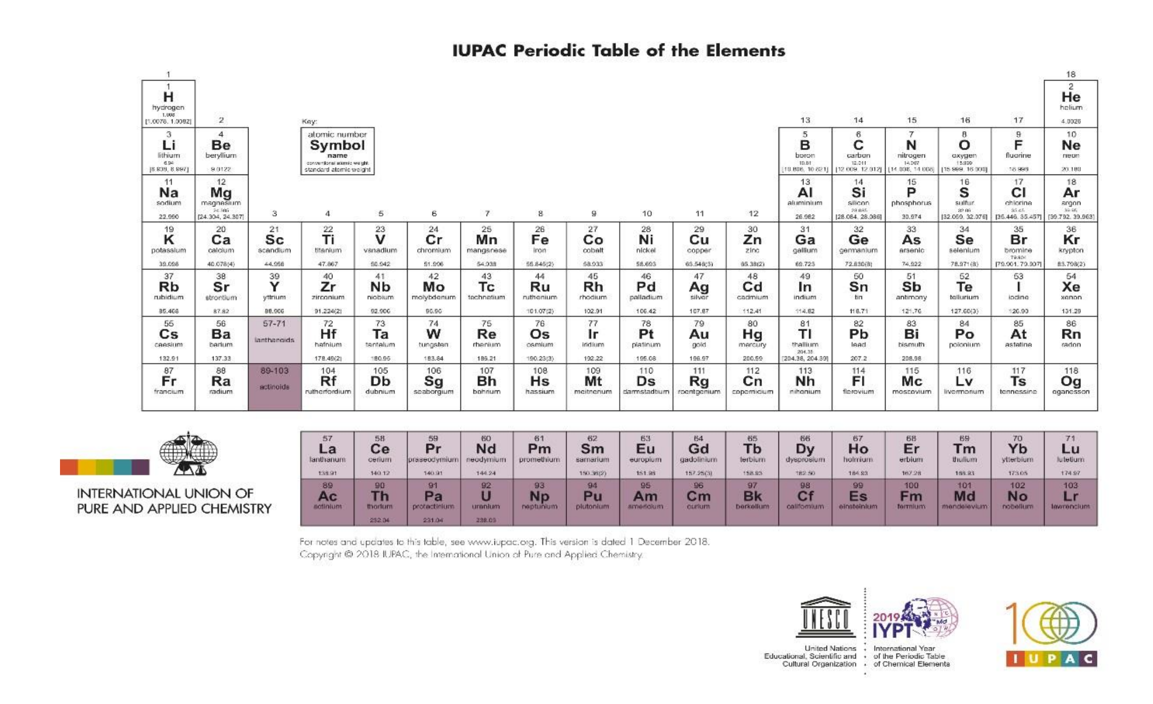


Fig. 1. Tabla periódica convencional, de longitud media o de 18 columnas.
Fuente: www.iupac.org

Se ha sugerido que una base más satisfactoria para la representación del sistema periódico se alcanzaría si se comenzara cada período con valores de $n + l$ (la suma de los dos primeros números cuánticos), en lugar de utilizar solamente n, ya que n + l posee un estatus más fundamental (véase Figura 2). A pesar de la tradicionalmente aceptada representación bidimensional, algunos autores han cuestionado este punto de vista al proponer representaciones tridimensionales, lo cual deja de lado el tradicional concepto de ‘tabla’. Una de ellas, denominada ‘Árbol de los Elementos’, fue propuesta por Fernando Dufour en 1990 y destaca ciertas similitudes químicas no incluidas en la tabla de dos dimensiones. En 2005, Stewart diseñó la representación del sistema periódico como un espiral tridimensional, conocida como ‘Galaxia Química’, cuya ventaja radica en la eliminación de los espacios entre los gases nobles y los metales alcalinos, como en la tabla periódica tradicional, enfatizando así la continuidad entre los elementos.

Un sistema periódico que en la actualidad concentra la atención de los expertos es la denominada ‘tabla periódica de escalón izquierdo’, propuesta por el ingeniero francés Charles Janet en 1929 y diseñada según un criterio estético (Figura 2). Esta tabla fue revivida por el educador en química Gary Katz (2001) algunos años atrás.

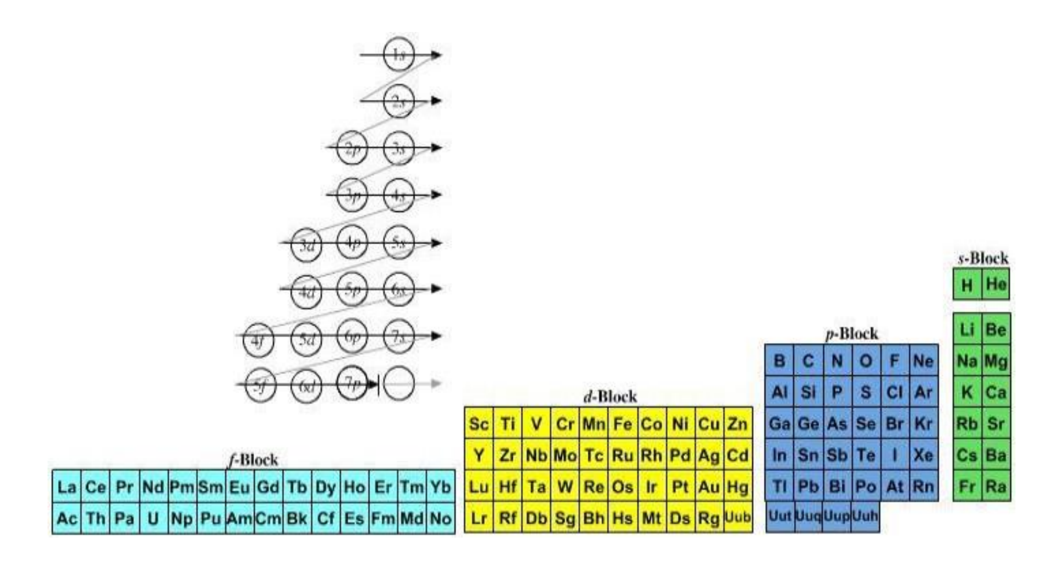


Fig. 2. Tabla periódica de escalón izquierdo

A diferencia de la tabla tradicional, en la tabla periódica de escalón izquierdo el helio se ubica encabezando los metales alcalino-térreos. Como resultado, todos los elementos de este grupo tienen dos electrones en la capa de valencia. Una segunda característica es que el bloque *s* completo se ha desplazado a la derecha y el helio es parte de él. Sin embargo, que dicho elemento se encuentre fuera del grupo de los gases nobles no es bien considerado por algunos químicos. Aunque no hay duda de que este elemento debe integrar el grupo de los alcalino-térreos según su configuración electrónica, algunos químicos han rechazado esta estrategia al afirmar que el principal objetivo de la tabla periódica es representar las propiedades químicas de los elementos y no sus configuraciones electrónicas, lo cual es motivo de controversia (*cfr.* Scerri, 2013; Labarca, 2013; Tsimmerman, 2013). Otra característica que posee la tabla de Janet es que los lantanoides y actinoides se incorporan al cuerpo principal de la misma. Una de las virtudes de su diseño es que muestra una forma regular, evitando así 'huecos' entre grupos de elementos, como el existente entre berilio y magnesio con boro y aluminio, tal como se presenta en la tabla periódica convencional. Además, la tabla convencional muestra un primer periodo de sólo dos elementos (hidrógeno y helio); por el contrario, en la representación de Janet todas las longitudes de periodo se repiten según la secuencia 2, 2, 8, 8, 18, etc.

3. La posición del hidrógeno y del helio

La ubicación del hidrógeno y el helio en el sistema periódico es posiblemente el tópico más debatido en el ámbito de los fundamentos de la tabla periódica. Desde hace mucho tiempo existen grandes desacuerdos respecto a la familia de elementos en las que deben incluirse tales elementos.

La cuestión acerca del lugar adecuado para el hidrógeno está presente desde la primera tabla periódica publicada por Mendeleev en 1869, en la que este elemento aparece desconectado de los demás. Su tabla de 1871 muestra al hidrógeno a la cabeza de los metales alcalinos en el grupo I, un lugar que sigue siendo muy popular hasta ahora. En 1906, Mendeleev elaboró su último sistema periódico en el que el hidrógeno conserva el lugar que ocupaba en su tabla anterior, pero ahora el helio aparece sobre la familia de los gases nobles (grupo 0), como suele hacerlo.

Algunos años antes, Thomas Bayley en 1882 y más adelante Julius Thomsen en 1895, diseñaron tablas periódicas en forma de pirámides invertidas. Estos autores representaron el hidrógeno en posición central y lo relacionaron con siete elementos, desde el litio hasta el flúor, mediante líneas. En 1922 Niels Bohr presentó una pirámide invertida a la izquierda similar a las tablas de Bayley y Thomsen, en la que añadió la familia de los gases nobles. El hidrógeno y el helio están próximos y colocados en el centro. Por medio de líneas, el autor conectó el hidrógeno con los metales alcalinos y los halógenos, y consideró al helio como miembro de los gases nobles.

En 1895, J. W. Retgers publicaba una tabla en la que el hidrógeno no se sitúa entre los metales alcalinos, sino encabezando la familia de los halógenos. En el sistema periódico de Irving Langmuir de 1919, el hidrógeno es el primer elemento de los metales alcalinos, pero el helio está ahora duplicado en la familia de los gases nobles y la de los metales alcalinotérreos. Una característica positiva de esta disposición es que ambos elementos se encuentran juntos. En el sistema periódico diseñado por el químico alemán Andreas von Antropoff en 1926, el hidrógeno se sitúa en el centro y se relaciona con el litio y el flúor. En el caso del helio, se coloca en la primera fila junto al hidrógeno y también encabeza el grupo 0, el de los gases nobles, lo cual significa que está duplicado a la izquierda y a la derecha de la tabla.

Al igual que en la tabla de Langmuir, el helio fue agrupado como miembro de los metales alcalinotérreos en una tabla diseñada por el ingeniero francés Charles Janet en 1928. Esta se conoce como la tabla periódica de escalón izquierdo, comentada en la sección anterior. Según Eric Scerri (2007), la elegante forma de este sistema periódico se

basaba en un criterio estético. A su vez, en 1943 Luder utilizó la configuración electrónica como criterio para posicionar al helio integrando dicha familia de elementos. Dos décadas más tarde, en 1964 Robert Sanderson proponía considerar la electronegatividad como un novedoso criterio categorial para situar al hidrógeno entre el boro (grupo 13) y el carbono (grupo 14). Muy recientemente, Kaesz y Atkins consideraban que, frente a las anomalías que presenta el hidrógeno para ubicarlo en algún grupo en particular, una solución posible es ubicarlo 'flotando' sobre el cuerpo principal de la tabla sin conexión con ningún grupo en particular (para mayores detalles, *cfr.* Labarca y Srivaths, 2016).

A modo de resumen, digamos entonces que respecto del hidrógeno, las opciones usualmente consideradas son: a) en el grupo 1 (metales alcalinos), ya que posee un electrón en la capa de valencia; b) encabezando el grupo 17 (halógenos), dado que los átomos de hidrógeno pueden formar iones negativos, al igual que los elementos de ese grupo; c) en el grupo 14, el grupo del carbono, ya que el hidrógeno muestra la mitad de su capa de valencia completa (2 electrones), al igual que el carbono (4 electrones); d) ubicarlo entre los grupos 13 y 14 cuando se considera como propiedad química su electronegatividad; y finalmente, e) 'flotando' sobre el cuerpo principal de la tabla, debido a las dificultades para integrar un grupo en particular.

La construcción de un sistema periódico requiere de dos pasos o instancias, a saber: 1) ordenar los elementos químicos de acuerdo con su número atómico creciente, lo cual da lugar a la denominada 'línea de Mendeleev'; y 2) la 'línea de Mendeleev' se particiona con el propósito de agrupar elementos en familias químicamente similares. El resultado son los *periodos* y los *grupos*.

En la actualidad son varios los candidatos a constituirse en el criterio para clasificar elementos en grupos: la espectroscopía, la electronegatividad, la estructura electrónica, la configuración electrónica, así como las triadas de elementos, un criterio propuesto en los últimos años. En general, es ampliamente aceptado que la configuración electrónica externa (o de la capa de valencia) establece el criterio de clasificación secundaria, aunque de manera no tan categórica como el criterio primario dado por el número atómico.

El criterio mecánico cuántico –es decir, el uso de orbitales y configuraciones electrónicas popularizado en las representaciones del sistema periódico por L. M. Simmons y V. M. Klechkovskii (Mazurs, 1974)– es el enfoque moderno para explicar la periodicidad química. De acuerdo con el enfoque reduccionista que predomina en el

ámbito de la ciencia química, el comportamiento químico de un elemento encuentra su mejor explicación en un dominio de partículas, en particular, vía su configuración electrónica dada por la denominada regla de Madelung – Klechkowskii (o regla *n* + *l*, donde *n* y *l* denotan los dos primeros números cuánticos), la cual brinda el orden en que se completan los orbitales de átomos en fase gaseosa, a saber:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d\ldots$$

La tesis según la cual la configuración electrónica externa gobierna la química de los elementos se asume, en general, como ‘cosa juzgada’ e impregna fuertemente la enseñanza del tema. Sin embargo, Scerri (2010) ha destacado que pese a que la mecánica cuántica proporciona una excelente manera de calcular las propiedades de los elementos individuales, no sucede lo mismo cuando se trata de determinar ‘propiedades globales’, vale decir, la membresía de elementos en grupos particulares. Si bien los elementos en el mismo grupo de la tabla periódica comparten la misma configuración electrónica de la capa externa del átomo, hay excepciones que pueden encontrarse entre los metales de transición (por ej. níquel, paladio y platino en el grupo 10)[2]. En este sentido, la mecánica cuántica no ha resuelto satisfactoriamente la posición de estos elementos debido a que *“La periodicidad en las propiedades químicas de los elementos es un tema complejo y sólo se refleja aproximadamente en las configuraciones electrónicas de los átomos”* (Scerri, 1991, p.122). Scerri (2007) advierte que *“[...] la posesión de un determinado número de electrones en la capa externa no es condición necesaria ni suficiente para la pertenencia de un elemento en cualquier grupo particular”* (p.242). Un ejemplo de ello es el caso del elemento torio (90), un actinoide perteneciente al bloque *f* que, sin embargo, presenta la configuración [Rn] $6d^2\ 7s^2$. Como afirma Jorgensen (1973, p.14): *“No existe la más mínima duda, sin embargo, de que no existe una relación simple entre la configuración electrónica en el estado basal del átomo neutro y la química del elemento en consideración”.*

La ubicación del helio también exhibe inconvenientes. ¿Debería permanecer encabezando la familia de los gases nobles, tal como en la tabla tradicional o, por el contrario, debería ser parte de la familia de los metales alcalino-térreos de acuerdo con su configuración electrónica? En los últimos tiempos, Scerri (2010, 2011) ha afirmado que

---

[2] Las configuraciones electrónicas del níquel, paladio y platino son [Ar] $4s^1\ 3d^9$, [Kr] $5s^0\ 4d^{10}$ y [Xe] $6s^1\ 4f^{14}\ 5d^9$, respectivamente.

el problema de la posición del hidrógeno y del helio tiene una solución correcta. Este autor propuso un nuevo criterio categorial para resolver la cuestión: la preservación o la creación de nuevas tríadas de elementos. Scerri recupera la idea de tríadas de elementos, propuesta por Johann Döbereiner en 1817, pero ahora con el número atómico en lugar del peso atómico. El resultado de la aplicación de este criterio es que el helio debe permanecer entre los gases nobles, dada la tríada 'perfecta' de números atómicos He(2), Ne(10), Ar(18). A su vez, el hidrógeno se convierte en parte de los halógenos, de acuerdo con la tríada H(1), F(9), Cl(17). Sin embargo, el estatus epistemológico de las tríadas de elementos como criterio para resolver esta cuestión es motivo de controversia (*cfr.* Bent, 2006; Scerri, 2010; Schwarz, 2010).[3]

Aunque no tan habitual como criterio clasificatorio de elementos en grupos, la electronegatividad ha tenido un renacimiento en los últimos años. Uno de sus principales defensores es Mark Leach (2013), quien defiende firmemente la electronegatividad para explicar la periodicidad química. Por su parte, Geoff Rayner-Canham y Tina Overton (2010) destacan que, si bien el hidrógeno no tiene un lugar definitivo en el sistema periódico, en base a su valor intermedio de electronegatividad entre los metales alcalinos y los halógenos tiene sentido situarlo entre dichas familias de elementos. Leland Allen (1989) propuso un sistema periódico en tres dimensiones en el que la electronegatividad era, de hecho, la tercera dimensión. Siguiendo el camino abierto por Sanderson en la década de 1960, Cronyn (2003) analiza la similitud del hidrógeno con la familia del carbono, proponiendo que el hidrógeno encabece tal grupo.

Aunque la electronegatividad es un concepto muy útil en la ciencia química desde mediados del siglo pasado, las diferentes escalas de electronegatividad que coexisten en la actualidad muestran que no existe un claro consenso respecto del significado del concepto. La caracterización sobre la naturaleza de la electronegatividad no es clara: ¿es una propensión? ¿es una propiedad o es simplemente una magnitud que tiene propósitos comparativos? La coexistencia de modelos incompatibles de electronegatividad comienza a despertar el interés de los filósofos de la química (para mayores detalles, véase el Capítulo 8 de este libro).

---

3 Una propuesta de tabla periódica utiliza también las triadas de elementos y discute las implicancias para su enseñanza (*cfr.* Zambon, 2019).

Se ha argumentado que el comportamiento anómalo de los dos primeros elementos del sistema periódico formaría parte de la conocida *'regla del primer elemento'*, según la cual, en su versión simple, el primer elemento de cualquier grupo de la tabla presenta anomalías cuando se compara con el resto de los elementos de su grupo. El hidrógeno es un gas, a diferencia de los demás miembros de la familia de los alcalinos. Sin embargo, en el caso de los gases nobles William Jensen y Henry Bent divergen a la hora de decidir la posición del helio. Para el primer autor, el helio sigue formando parte de los gases nobles, mientras que Bent lo reubica entre los metales alcalinotérreos, de acuerdo con la tabla periódica de escalón izquierdo (Scerri, 2007).

Otra línea argumentativa ha sido propuesta recientemente por Labarca y Srivaths (2016) para elucidar el problema. Identificados los tres criterios principales para clasificar elementos en grupos, los autores se preguntan qué criterio categorial debería favorecerse: ¿las configuraciones electrónicas, la electronegatividad o las tríadas de número atómico? La situación luce como un trilema. Sin embargo, si se admite que ninguno de los tres candidatos tiene *prioridad explicativa*, es decir, si ninguno de ellos proporciona un modo inequívoco de clasificar los elementos en grupos, es razonable preguntarse entonces por qué debería privilegiarse un único criterio. Esto los conduce a la siguiente pregunta: ¿por qué no una nueva disposición en la que se consideren simultáneamente los principales criterios secundarios? En otras palabras, ¿es posible un nuevo y positivo criterio secundario para decidir la ubicación del hidrógeno y el helio en el sistema periódico?

A la luz de estos argumentos, los autores sugieren una suerte de 'relación democrática' entre los tres criterios secundarios: configuraciones electrónicas, electronegatividad y tríadas de número atómico. Esto significa resistirse a comprometer tanto al hidrógeno como al helio con cualquier criterio de clasificación en particular. Pero, al mismo tiempo, esto implica que ni el hidrógeno flota *'a la Atkins'* (Kaesz y Atkins, 2003) ni que ambos elementos están desconectados del resto de los elementos. Por el contrario, en la nueva disposición propuesta ambos elementos *"tienen un pie en cada uno de los criterios"*, parafraseando y ampliando la afirmación de Michael Laing (2007, p.132).

Por tanto, la nueva tabla tiene en cuenta los tres criterios principales propuestos para resolver la posición de los dos primeros elementos: la mecánica cuántica, la electronegatividad y las tríadas de número atómico. Esto implica que todos ellos tienen el mismo estatus epistemológico, hasta nuevos argumentos o nueva evidencia a analizar.

Esta alternativa permite preservar información y, al mismo, tiempo, exhibir la ontología química y la ontología de partículas, las que suelen asumirse mutuamente irreconciliables. En la nueva tabla periódica el hidrógeno se encuentra entre los metales alcalinos y los halógenos, mientras que el helio se ubica entre los gases nobles y los elementos alcalinotérreos. Esta posición ha sido objetada por algunos autores (Cvetković y Petruševski, 2017; Scerri, 2017) y replicada por Labarca y Srivaths (2017).

4. El problema de la membresía del grupo 3

En abril de 2015 un equipo internacional de investigadores comunicaba que había logrado medir la primera energía de ionización del laurencio, un elemento superpesado de número atómico 103 (Sato *et al*., 2015). El resultado experimental, publicado en la prestigiosa revista científica *Nature*, generaba importantes repercusiones en las comunidades química y física (*cfr.* por ejemplo, Castelvecchi, 2015) y, al mismo tiempo, daba lugar a la reapertura de un antiguo y complejo debate que concierne a los elementos que deben formar parte del grupo 3 de la tabla periódica.

En general, la tabla periódica tradicional que se enseña incluye los elementos escandio (Z = 21), itrio (Z = 39), lantano (Z = 57) y actinio (Z = 89). Sin embargo, es posible encontrar varias representaciones del sistema periódico de comienzos del siglo XX donde estos dos últimos elementos eran reemplazados por lutecio (Z = 71) y laurencio (Z = 103) (*cfr.* Mazurs, 1974). De acuerdo con Jensen (1982), el consenso mencionado parece haberse instaurado progresivamente a partir de la década de 1940, cuando la mecánica cuántica se fue cristalizando como el enfoque moderno para explicar la periodicidad química. En la actualidad, varios químicos, educadores en química y filósofos de la química consideran que los dos últimos elementos del grupo deberían sustituirse por lutecio y laurencio, respectivamente. Este problema epistemológico y disciplinar presenta ya varias décadas de debate (*cfr.* Luder, 1943; Landau y Lifshitz, 1959; Hamilton y Jensen, 1963; Jensen, 1982, 2015; Clark y White, 2008; Lavelle, 2008; Scerri, 2009, 2011; Xu y Pyykko, 2016; Labarca y Martínez González, 2019; Scerri, 2019a,b). En este complejo escenario, la IUPAC (2015) ha conformado un comité de estudio que se propone hacer una recomendación sobre el tema en cuestión.

El trabajo que suele tomarse como punto de partida en la discusión filosófica sobre el tema es el del químico estadounidense William Jensen (1982). En el mismo, el autor ponía de relieve que las configuraciones electrónicas de la capa de valencia $(n\text{-}1)d^1\ ns^2$

no constituyen un criterio categorial que permita elucidar el problema, ya que el La y el Lu así como el Ac y el Lr son candidatos de igual derecho a integrar el bloque *d* de elementos, debajo del Sc y del Y, en los períodos 6 y 7 de la tabla periódica.

El La y el Ac son elementos de transición pertenecientes al bloque *d* del sistema periódico. Cuando se observan las configuraciones de los átomos de estos elementos, parecen pertenecer, *a priori*, al bloque *f*. Pero desde hace algunas décadas se conocen los fuertes efectos relativistas presentes en el Lr, los cuales producen una configuración electrónica anómala de acuerdo con su posición en el sistema periódico (Desclaux y Fricke, 1980). Ya en 1971 se sugería la nueva configuración teórica para este elemento [Rn] $5f^{14}$ $7s^2$ $7p^1$ (Brewer, 1971) la cual fue recientemente corroborada (Sato *et al.*, 2015).

Veamos entonces cuáles son las configuraciones electrónicas externas de los dos pares de elementos involucrados en el debate:

La (57) = [Xe] $5d^1$ $6s^2$

Ac (89) = [Rn] $6d^1$ $7s^2$

versus

Lu (71) = [Xe] $4f^{14}$ $6s^2$ $5d^1$

Lr (103) = [Rn] $5f^{14}$ $7s^2$ $7p^1$

Frente a la dificultad que presentan las configuraciones electrónicas para decidir que par de elementos deben formar parte del bloque *d* en los periodos 6 y 7, Jensen (1982) señalaba que es necesario considerar analogías intraperiodos e intragrupos. Para ello, recurrió a propiedades tales como el radio atómico, la suma de los dos primeros potenciales de ionización, el punto de ebullición y la electronegatividad con el propósito de examinar la variación que manifiestan entre los elementos que integran los metales de transición. Este análisis comparativo muestra una mayor regularidad en la secuencia Sc–Y–La respecto de la secuencia Sc–Y–Lu. El autor agregaba que se aprecia igual resultado cuando se comparan otras propiedades fisicoquímicas como puntos de fusión, estructuras cristalinas a temperatura ambiente, etc.

Laurence Lavelle (2008) ha manifestado una clara oposición al intento de desplazar al bloque *d* de elementos al Lu y al Lr y colocarlos bajo el Y. Si el La y el Ac fueran desplazados del grupo 3, tales elementos deberían encabezar el bloque *f*, resultado que este autor encuentra inaceptable dado que los átomos de tales elementos poseen un

electrón en el orbital *d* pero están ausentes en el orbital *f*, lo que no ocurre en el caso del Lu y del Lr. La configuración electrónica en el estado basal calculada del Lr, afirma Lavelle, justificaría reposicionarlo debajo del elemento talio (Z = 81) en el grupo 13, es decir, formando parte del bloque *p* y no del bloque *d*, como se pretende. Esta alternativa no es adecuada para Lavelle, lo cual conduce a que el Lr debe permanecer integrando el bloque f de elementos. Scerri (2009) ha enfrentado este argumento impugnando la idea según la cual la posesión de un electrón *f* en la capa de valencia es un requisito para que un elemento pertenezca al (nominalmente llamado) bloque *f*. Este autor brinda como ejemplo el caso del elemento torio (Z = 90), cuya configuración es [Rn] $6d^2$ $7s^2$, y que forma parte de dicho bloque de elementos pese a no poseer electrones externos en dicho orbital.

Frente a criterios basados en configuraciones electrónicas, así como en propiedades físicas y químicas que no considera completamente categóricos para resolver el problema, Scerri (2011) ha apelado al enfoque de las triadas de elementos. De acuerdo con este criterio, propone entonces reemplazar el lantano y el actinio por el lutecio y el laurencio, dada la tríada 'perfecta' de número atómico que quedaría conformada: Y(39), Lu(71), Lr(103).

Otro enfoque recientemente propuesto para elucidar este problema se basa en la identificación y el análisis conceptual de los principales criterios para clasificar elementos en grupos (Labarca y Martínez González, 2019). Sobre la base de la solución propuesta para el problema del hidrógeno y del helio (Labarca y Srivaths, 2016), los autores extrapolan dicho argumento al debate que presenta la membresía del grupo 3. Cuando los tres criterios (configuraciones electrónicas, electronegatividad y triadas de elementos) son evaluados respecto de la posición del par La-Ac versus Lu-Lr, se aprecia que la solución propuesta consiste en una suerte de 'balance' o de 'relación democrática' entre los tres principales criterios. Y al considerarlos en forma simultánea, el Lu y el Lr deben efectivamente formar parte del grupo 3 en los periodos 6 y 7 del sistema periódico.

Labarca, Quintanilla e Izquierdo (2022a,b) presentan algunas estrategias para la enseñanza y aprendizaje del problema del grupo 3, basadas en las directrices que proporciona la investigación en didáctica de la química e historia de la química, con la finalidad de promover la argumentación y la explicación científica en el aula y contribuir así a aprendizajes de nivel superior.

Hasta aquí hemos reseñado las dos perspectivas propuestas respecto de este problema en la tabla periódica estándar o de longitud media. Por un lado, el tradicional agrupamiento Sc, Y, La, Ac que se observa en buena parte de las tablas publicadas en los textos de química de nivel universitario a la fecha (*cfr.* por ejemplo, Atkins y de Paula, 2010; Chang, 2010; Zumdahl y Zumdahl, 2010; Oxtoby *et al.*, 2012) y, por otro, el enfoque que sugiere fuertemente que el grupo 3 debería estar conformado por los elementos Sc, Y, Lu y Lr sobre la base de los argumentos explicitados. En relación con las configuraciones electrónicas, como vimos, los argumentos no parecen convincentes para decidir su reemplazo. Pero una tercera alternativa ha sido sugerida por Wen-Hua Xu y el destacado químico cuántico finlandés Pekka Pyykkö.

En su trabajo, Xu y Pyykkö (2016) exploran la química del elemento laurencio. A partir de un detallado trabajo donde analizan sus potenciales de ionización, así como estudios moleculares de sus hidruros, monocarbonilos y sus tricloruros, y complejos divalentes, los autores sugieren mantener el lutecio y el laurencio entre los lantanoides y actinoides, respectivamente. Para arribar a dicha conclusión, privilegian el comportamiento químico en los sistemas mencionados por sobre la configuración electrónica del estado basal del átomo. La propuesta de Xu y Pyykkö implicaría entonces dos filas de 15 elementos *f*, La-Lu y Ac-Lr, en lugar de los 14 elementos vistos hasta aquí en las dos propuestas reseñadas. La representación de los elementos que se obtiene va en la misma dirección que la que puede apreciarse en la tabla periódica que se publica en el sitio de la IUPAC a la fecha (véase Figura 1).

Scerri (2019a,b) ha abordado el problema una vez más, presentando un nuevo argumento en favor de la sustitución del La y Ac por Lu y Lr. En su análisis vuelve a abogar por expandir la tabla periódica a 32 columnas. La ventaja, afirma, es que cada elemento estaría ubicado en su correcta secuencia de acuerdo con su número atómico creciente, al moverse a través de cada periodo de izquierda a derecha.

5. La reducción de la tabla periódica

Dos son las perspectivas actuales sobre el problema de la reducción del sistema periódico. La primera de ellas adopta un enfoque matemático que apela a los estudios periódicos de la similitud, la teoría de grupos y la teoría de la información (*cfr.* por ejemplo, Thyssen, 2013). El resultado de estos estudios está comenzando a analizarse. El segundo enfoque se centra en la aplicación de la mecánica cuántica a la tabla periódica. Scerri (2012) señala

que la teoría cuántica proporciona sólo una explicación parcial de la forma de la tabla periódica, ya que, si bien es posible predecir ciertas propiedades individuales de los elementos, no permite capturar propiedades 'globales' tales como la pertenencia de los elementos a ciertos grupos y las relaciones entre ellos. La idea de las configuraciones electrónicas como responsables de las propiedades químicas de los elementos es casi un dogma que generaciones de estudiantes deben aprender. Sin embargo, Scerri hace hincapié en que este enfoque no es apropiado, por ejemplo, para decidir el lugar del hidrógeno y del helio o bien los elementos que pertenecen al grupo 3, como ha sido reseñado.

Por otra parte, el conjunto de los cuatro números cuánticos (*n*, *l*, *m*, *s*) predice que las capas atómicas pueden contener un máximo de 2, 8, 18 o 32 electrones, lo que está de acuerdo con la longitud de los períodos de la tabla. Sin embargo, la mecánica cuántica no justifica la repetición de las longitudes de los periodos, excepto el primero. En este sentido, es interesante destacar el debate actual sobre el estatus de la regla de Madelung-Klechkowskii. ¿Se ha derivado la misma a partir de primeros principios (*ab initio*)? Si así fuera, habría un fuerte argumento para apoyar el punto de vista reduccionista. Pero mientras que algunos autores afirman que el objetivo se ha alcanzado, otros señalan que la regla de Madelung es sólo una regla semiempírica (Scerri 2012). El químico teórico Eugen Schwarz (2007) ha señalado que esta regla es relativamente poco importante en el mundo químico, ya que se diseñó para átomos neutros, libres y no unidos químicamente mientras que la atención debería dirigirse, por el contrario, a los átomos unidos.

6. Otros problemas

Como hemos visto, el sistema periódico de los elementos continúa siendo un vigente tópico de debate científico-filosófico. Otro de los problemas radica en la siguiente pregunta: ¿cuál es el límite para la síntesis de nuevos elementos? ¿Es posible extender el sistema periódico indefinidamente? La tabla periódica contemporánea consiste en 118 elementos conocidos. La síntesis de elementos superpesados (Z >= 104) es un tarea muy dificultosa, sobre todo teniendo en cuenta el tiempo de vida media de los isótopos; en el caso del Oganeson (Z = 118) es menor a 1 milisegundo. Pyykkö (2019) afirma que el límite debería ser no mayor a Z = 172, aunque lo que sucede físicamente superando tal valor no es completamente comprendido. Las predicciones se basan en cálculos químicos

cuánticos teóricos y relativistas (para un reciente análisis sobre los elementos superpesados, *cfr.* Giuliani *et al.*, 2019).

Vinculado a los elementos superpesados, otro de los tópicos radica en el poder de la ley periódica. La existencia de efectos relativistas que se incrementan a medida que aumenta la carga nuclear podría resultar un fuerte desafío al poder predictivo de la ley. En efecto, en el caso de los elementos 104 (rutherfordio) y 105 (dubnio) se encontró que su comportamiento químico difería del de los elementos hafnio y tantalio, quienes los preceden en los grupos 4 y 5. El desafío fue aún mayor en el caso del copernicio (Z = 112) donde los cálculos relativistas indicaban un comportamiento químico de gas noble y no similar al mercurio, grupo al cual debería pertenecer. Los experimentos llevados a cabo sobre las entalpías de sublimación del copernicio mostraron, por el contrario, que pertenece al grupo 12 junto con el zinc, el cadmio y el mercurio. En resumen, no es claro, aún, si el principio según el cual los elementos de un mismo grupo de la tabla periódica se comportan de forma similar sigue siendo válido para los átomos muy pesados (Scerri, 2013).

Por otro lado, en 1925 el químico alemán Andreas von Antropoff sugería la existencia de una nueva forma de materia compuesta por neutrones. Este hipotético nuevo elemento, al que llamó 'neutronio', sería un agregado de neutrones capaz de reaccionar químicamente con otros elementos. La propuesta se formuló siete años antes de que James Chadwick anunciara la existencia de una nueva partícula elemental, el neutrón, y cuatro décadas antes de la observación de la primera estrella de neutrones. Durante las décadas posteriores varias representaciones del sistema periódico incluyeron el neutronio como elemento.

En la actualidad, Philip Stewart (2005) es el principal defensor de la existencia de un elemento de número atómico cero, el que debería ser parte del sistema periódico encabezando la familia de los gases nobles. Esta propuesta ha sido revisada críticamente analizando, por un lado, el problema de la naturaleza de los elementos –una noción central para discutir la propuesta de Stewart– y, por otro, cuáles son las propiedades químicas del 'neutronio' que permitirían considerarlo un posible miembro de la familia de los gases nobles. A la luz del análisis precedente, parece más cauto, tanto desde el punto de vista científico como filosófico, pensar el neutrón sólo como un componente estructural de un elemento (Labarca, 2016).

Referencias bibliográficas

Allen, L. (1989). "Electronegativity is the average one-electron energy of the valence-shell electrons in ground-state free atoms". *Journal of American Chemical Society* 111: 9003–9014.

Atkins, P. y de Paula, J. (2010). *Physical Chemistry*. 9th edition. New York: W. H. Freeman and Co.

Bent, H. A. (2006). *New Ideas in Chemistry from Fresh Energy for the Periodic Law*. Bloomington: Author House.

Brewer, L. (1971). "Energies of the electron configurations of the lanthanides and actinides". *Journal of the Optical Society of America* 61: 1101–1111.

Castelvecchi, D. (2015). "Exotic atom struggles to find its place in the periodic table". *Nature* (April 8).

Chang, R. (2010). *Química*. 10ma. edición. México D.F.: Mc-Graw-Hill.

Clark, R. W. y White, G. D. (2008). "The flyleaf periodic table". *Journal of Chemical Education* 4: 497.

Cronyn, M. W. (2003). "The proper place for hydrogen in the periodic table". *Journal of Chemical Education* 80: 947–951.

Cvetković, J. y Petruševski, V. (2017). "On the placement of hydrogen and helium in the periodic system: A comment". *Chemistry: Bulgarian Journal of Science Education* 26: 167–170.

Desclaux, J. P. y Fricke, B. (1980). "Relativistic prediction of the ground state of atomic lawrencium". *Journal of Physics* 41: 943–946.

Giuliani, S. A.; Matheson, Z.; Nazarewicz, W. y Olsen, E. (2019). "Colloquium: Superheavy elements: Oganesson and beyond". *Reviews of Modern Physics* 91: 011001-1–011001-25.

Hamilton, D. C. y Jensen, M. A. (1963). "Mechanism for superconductivity in lanthanum and uranium". *Physics Review Letters* 11: 205–207.

IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) (2015). En Internet: <https://iupac.org/projects/project-details/?project_nr=2015-039-2-200>. Acceso: Julio 2022.

Jensen, W. (1982). "The positions of Lanthanum (Actinium) and Lutetium (Lawrencium) in the periodic table". *Journal of Chemical Education* 8: 634–636.

Jensen, W. (2015). "The positions of Lanthanum (Actinium) and Lutetium (Lawrencium) in the periodic table: an update". *Foundations of Chemistry* 1: 23–31.

Jorgensen, C. K. (1973). "The loose connection between electron configuration and the chemical behavior of the heavy elements". *Angewandte Chemie International Edition* 12: 12–19.

Kaesz, H. y Atkins, P. W. (2003). "A central position for hydrogen in the periodic table". *Chemistry International* 25: 14.

Katz, G. (2001). "The periodic table: an eight period table for the 21st centrury". *The Chemical Educator* 6: 324–332.

Labarca, M. (2013). "Table talk". *Scientific American* 7: 8–9.

Labarca, M. (2016). "An element of atomic number zero?". *New Journal of Chemistry* 40: 9002–9006.

Labarca, M. y Martínez González, J. C. (2019). "Acerca de los elementos pertenecientes al grupo 3 de la tabla periódica: Un nuevo enfoque". *THEORIA – An International Journal for Theory, History and Foundations of Science* 34: 297–310.

Labarca, M. y Srivaths, A. (2016). "On the placement of hydrogen and helium in the periodic system: A new approach". *Chemistry: Bulgarian Journal of Science Education* 25: 514–530.

Labarca, M. y Srivaths, A. (2017). "On the placement of hydrogen and helium in the periodic system: A response to Cvetković and Petruševski". *Chemistry: Bulgarian Journal of Science Education* 26: 663–666.

Labarca, M.; Quintanilla, M. y Izquierdo-Aymerich, M. (2022a). "El problema del grupo 3 de la tabla periódica: su enseñanza mediante la argumentación y la explicación científica. Primera parte", *Ciência & Educação (Bauru)* 28, e22013: 1-12.

Labarca, M., Quintanilla, M. y Izquierdo-Aymerich, M. (2022b). "El problema del grupo 3 de la tabla periódica: su enseñanza mediante la argumentación y la explicación científica. Segunda parte", *Ciência & Educação (Bauru)* 28, e22014: 1-13.

Laing, M. (2007). "Where to put hydrogen in a periodic table?". *Foundations of Chemistry* 9: 127–137. Landau, L. D. y Lifshitz, E. M. (1959). *Quantum Mechanics*. London: Pergamon.

Lavelle, L. (2008). "Lanthanum (La) and Actinium (Ac) should remain in the d-block". *Journal of Chemical Education* 85: 1482–1483.

Leach, M. (2013). "Concerning electronegativity as a basic elemental property and why the periodic table is usually represented in its medium form". *Foundations of Chemistry* 15: 13–29.

Leigh, G. J. (2009). "Periodic tables and IUPAC". *Chemistry International* 31: 4–6.

Luder, W. F. (1943). "Electron configuration as the basis of the periodic table". *Journal of Chemical Education* 20: 21–26.

Mazurs, E. G. (1974). *Graphic Representations of the Periodic System During One Hundred Years.* 2nd edition. Alabama: University of Alabama Press.

Oxtoby, D. M., Gillis, H. P. y Campion, A. (2012). *Principles of Chemistry*. 7th edition. Belmont: Brooks/Cole.

Pyykkö, P. (2019). "An essay on periodic tables". *Pure and Applied Chemistry* 91: 1959–1967.

Rayner-Canham, G. y Overton, T. (2010). *Descriptive inorganic chemistry*. New York: W. H. Freeman & Co.

Rich, R. y Laing, M. (2011). "Can the periodic table be improved?". *Educación Química* 22: 162–165.

Sato, T. K., Asai, M., Borschevsky, A., Stora, T., Sato, N., Kaneya, Y., Tsukada, K., Düllmann, Ch. E., Eberhardt, K., Eliav, E., Ichikawa, S., Kaldor, U., Kratz, J. V., Miyashita, S., Nagame, Y., Ooe, K., Osa, A., Renisch, D., Runke, J., Schädel, M., Thörle-Pospiech, P., Toyoshima, A. & Trautmann, N. (2015). "Measurement of the first ionization potential of lawrencium, element 103". *Nature* 520: 209–212.

Scerri, E. (1991). "Chemistry, spectroscopy, and the question of reduction". *Journal of Chemical Education* 68: 122–126.

Scerri, E. (2007). *The Periodic Table – Its Story and Its Significance*. New York: Oxford University Press.

Scerri, E. R. (2009). "Which elements belong in group 3?". *Journal of Chemical Education* 86: 1188.

Scerri, E. (2010). "Explaining the periodic table, and the role of chemical triads". *Foundations of Chemistry* 12: 69–83.

Scerri, E. (2011). *The Periodic Table. A Very Short Introduction*. Oxford: Oxford University Press.

Scerri, E. (2012). "What is an element? What is the periodic table? And what does quantum mechanics contribute to the question?". *Foundations of Chemistry* 14: 69–81.

Scerri, E. (2013). "Cracks in the Periodic Table". *Scientific American* 6: 68–73.

Scerri, E. (2014). "Sobre una óptima tabla periódica". *Uruguay Ciencia* 17: 30–33.

Scerri, E. R. (2017). "A comment on the Srivaths – Labarca periodic table". *Chemistry: Bulgarian Journal of Science Education* 26: 667–671.

Scerri, E. R. (2019a). "Looking backwards and forwards at the development of the periodic table". *Chemistry International* 41: 16–20.

Scerri, E. R. (2019b). "Happy birthday to the periodic table". *European Journal of Chemistry* 25: 7410–7415.

Schwarz, W. H. E. (2007). "Recommended questions on the roads towards a scientific explanation of the periodic system of the chemical elements with the help of the concepts of quantum physics". *Foundations of Chemistry* 9: 139–188.

Schwarz, W. H. E. (2010). "The Full Story of Electron Configurations". *Journal of Chemical Education* 87: 444–448.

Stewart, P. (2005). "A new image of the periodic table". *Education in Chemistry* 6: 156–158.

Thyssen, P. (2013). *Symmetry and Symmetry Breaking in the Periodic Table. Towards a Group-Theoretical Classification of the Chemical Elements*. Tesis Doctoral, Faculty of Science, Department of Chemistry, KU Leuven, Science, Engineering and Technology: Leuven.

Tsimmerman, V. (2013). "Table talk". *Scientific American* 7: 8–9.

Xu, W. H. y Pyykkö, P. (2016). "Is the chemistry of lawrencium peculiar?". *Physical Chemistry. Chemical Physics* 18: 17351–17355.

Zambon, A. (2019). "Periodicity Trees in a Secondary Criterion of Periodic Classification: Its Implications for Science Teaching and Communication". *Substantia: An International Journal of History of Chemistry* 3 Suppl. 4: 101–114.

Zumdahl, S. y Zumdahl, S. (2010). *Chemistry*. 8th edition. Belmont: Brooks Cole.

CAPÍTULO 4

Reduccionismos en filosofía de las ciencias y sus problemas

Cristian López
Universidad de Buenos Aires – Universidad de Lausanne

1. Introducción

¿Cuál es la relación entre la teoría cuántica de campos o la relatividad general, consideradas teorías físicas *fundamentales*, y otras teorías científicas tales como la química cuántica, la química orgánica, la biología o las neurociencias, usualmente consideradas no fundamentales? ¿Cuál es la relación entre un globo aerostático en tanto sistema termodinámico y los sistemas mecánicos que lo *constituyen*? ¿Qué tipo de relaciones pueden establecerse entre diferentes teorías científicas con diferentes dominios y rangos de aplicación en el ideario de una ciencia *unificada*? A lo largo del siglo veinte, estas preguntas estuvieron relacionadas, de una manera u otra, con la noción de *reducción* en ciencias. En un sentido intuitivo, la noción refiere a lograr cierta 'simplificación' o 'unidad' en el complejo y plural edificio de teorías, modelos, metodologías y ontologías científicas. Unidad y simplificación que parece depender de la capacidad de recuperar y/o expresar una teoría, un modelo, una metodología o una ontología en términos de otra, estableciendo cierta jerarquización. En términos generales y muy simples el problema de la reducción referiría, por lo tanto, a si es posible establecer cierto tipo de relaciones entre nuestras teorías y conceptos científicos que conduzcan a cierta unidad y jerarquización entre ellos. La mejor manera de especificar estas relaciones interteóricas siguiendo este ideario generalizado ha sido en términos de *relaciones de reducción*.

Cualquier modelo de reducción involucra al menos tres elementos: (a) una teoría de orden inferior reductora (la teoría base, más fundamental), (b) una teoría de orden superior reducida (teoría 'target', menos fundamental), y (c) algún tipo de relación asimétrica entre ellas. Cómo entender esta relación y las posibilidades de ser definida y

establecida rigurosa y exitosamente ha ocupado buena parte de las discusiones de filosofía de las ciencias durante el siglo veinte. Los diferentes modelos de reducción han buscado mostrar cómo tal empresa es viable e incluso deseable. Tal viabilidad depende, en buena medida, del tipo de modelo de reducción y de cómo el concepto es entendido. Y si bien han existido posiciones hegemónicas al respecto, lo cierto es que no hay una idea unívoca de reducción en la bibliografía contemporánea: reduccionistas contemporáneos han oscilado entre posiciones más conservadores y rígidas, y posiciones más liberales y laxas. Mientras que algunos/as entienden la reducción como un proyecto global, otros/as la entienden términos locales; mientras que algunos/as consideran que la reducción es incompatible con nociones tales como emergencia, otros/as piensan que pueden articularse perfectamente sin traicionar el ideario de unificación y jerarquización. Para sumar mayor complejidad, no hay un único sentido, o dimensión, a lo largo del cual el concepto de reducción deba ser entendido: si bien usualmente el concepto ha sido definido en términos teórico-formales vinculando diferentes teorías científicas mediante vínculos deductivos, hoy en día la noción de reducción suele recibir también un significado más ontológico y epistémico. Algunos/as han entendido el proyecto reduccionista en términos *conservativos*, donde las teorías reducidas (y menos fundamentales) juegan un papel epistémico ineliminable; otros/as han pensado que resultan simplemente superfluas y pueden ser *eliminadas*.

El objetivo de este capítulo es doble. En primer lugar, busca mostrar la complejidad del concepto de reducción tal como es entendido en la filosofía de las ciencias contemporánea; en este sentido, busca trazar un mapa general que permita al lector orientarse a través de los diferentes conceptos de reducción, sus clasificaciones y sus relaciones. En segundo lugar, el capítulo muestra brevemente en qué medida existe un problema con el proyecto reduccionista a la luz de algunas críticas que han surgido en las últimas décadas.

2. Motivación del problema

Supongamos que el estado de nuestro conocimiento científico actual es el siguiente. A lo largo de los últimos cinco siglos, hemos desarrollado un sinfín de teorías y modelos científicos que describen y predicen con un grado de precisión asombrosa el comportamiento de diferentes sistemas a diferentes niveles: desde el movimiento de galaxias hasta transiciones cuánticas, pasando por reacciones químicas diversas, análisis

de movimiento migratorio de aves y depresiones clínicas. Pero no sólo eso, sino también que hemos logrado establecer con exactitud los vínculos entre nuestros diferentes modelos y teorías científicas: no sólo hemos llegado a obtener un conocimiento sumamente preciso de los organismos vivos, sino que hemos llegado a comprender que, a fin de cuentas, los organismos vivos no son más que una serie de reacciones químicas entre las moléculas que los constituyen. Todo sistema biológico puede explicarse, con suficiente paciencia y tiempo para escuchar la extensa explicación, en términos moleculares. Por supuesto, tenemos la ciencia perfecta que describe el comportamiento de tales moléculas, la química. Sin embargo, este no es el fin de la historia.

Luego de dedicada investigación, comprendimos que en realidad las moléculas químicas y sus reacciones dependían de leyes y sistemas físicos más fundamentales. A fin de cuentas, las moléculas no eran más que átomos, electrones girando alrededor de un núcleo, otras partículas relevantes y un conjunto cada vez más pequeño de fuerzas que hacen que la materia no se disperse, pero que tampoco colapse. Entonces, uno podría, al menos en principio, describir y predecir el comportamiento de moléculas y sus propiedades en términos puramente físicos. Explicación larga y extenuante, sin dudas, pero no sólo posible sino mucho más precisa y poderosa. Y, de ahí en más, la escalera de lo fundamental sólo desciende cada vez más y más hasta alguna teoría última, de donde emanan (en sentido tanto lógico como metafísico) todas las propiedades del mundo tal como lo conocemos, desde estados mentales hasta la tasa de expansión de epidemias, desde índices de solubilidad hasta el éxito o el fracaso de un tratamiento médico contra el cáncer; todo se encuentra, de alguna manera, encriptado en un conjunto de propiedades y ecuaciones fundamentales. El mundo natural y el conjunto de teorías y modelos que lo describen son un edificio perfectamente estratificado, donde los niveles superiores dependen (en un sentido lógico, epistémico, metodológico y hasta metafísico) de los niveles superiores.

Ciertamente, el mundo natural y nuestro conocimiento científico actual no luce, en absoluto, como esta imagen. En lugar de un edificio estratificado y bien interconectado, la ciencia actual luce mucho más como una vieja ciudad medieval, con sus calles irregulares, callejones sin salida y construcciones a medida de las urgencias y necesidades. Entre escaleras que llevan a ninguna parte y regiones casi completamente aisladas, algunos/as han defendido que nuestro conocimiento científico parece signado por la des-unidad, impasible de cualquier ordenamiento planificado y perfectamente

estratificado. Otros/as, han argumentado que tal des-unidad es o bien aparente, o bien meramente temporal, y que le ideario de una ciencia unificada debería guiar la actividad científica y cualquier interpretación filosófica de ella. En este sentido, la unificación siempre ha estado ahí, al menos en un sentido normativo: allí donde hemos encontrado vínculos y cierto ordenamiento estratificado, la ciencia ha progresado enormemente. Ante la pluralidad reinante, muchos/as han resaltado que es maravillosamente sorprendente que hayamos encontrado vínculos inter-teóricos y de dependencia tan fuertes. En consecuencia, este ideal debe perseguirse para acercar nuestro conocimiento científico lo más posible al ideal de un edificio del conocimiento estratificado y bien conectado. Y eso depende de encontrar el tipo correcto de relación entre diferentes teorías científicas. Muchos/as han defendido que el tipo adecuado de relación inter-teórica que conduce a este fin debe ser expresada mediante vínculos *reductivos*.

Buena parte de la filosofía de las ciencias del siglo veinte estuvo marcada no sólo por la idea de unidad científica, sino también por cómo establecer vínculos reductivos entre teorías. Lo cierto es que, más allá de una idea general que busca la unificación del conocimiento científico mediante métodos de simplificación y estratificación, existen muchos sentidos de reducción, muchos modelos y diversos compromisos epistémicos, metodológicos y metafísicos. Por lo tanto, sería más apropiado hablar de un proyecto heterogéneo que dio lugar a diferentes tipos de *reduccionismos*. En un extremo del espectro, existen posiciones como la de Ernst Rutherford quien dijo que toda la ciencia es física, el resto es colección de estampitas. Pocos (y me atrevo a decir que nadie en nuestros días) defiende una idea de reducción tan extrema. En el otro extremo, existen modelos de reducción más refinados, menos ambiciosos, en general de aplicación local, heurísticos y más liberales. Asumiendo que la idea de unificación es loable y que la pluralidad científica puede, y debe, ser simplificada, el problema es *generar* modelos de reducción que conduzcan a este fin.

3. Reduccionismos científicos: cinco modelos de reducción

Si bien posiciones unificacionistas y reduccionistas en sentido general han sido inherentes a la filosofía misma en todas sus ramificaciones, el concepto de 'reducción' como problema y empresa filosófica ha sido una marca distintiva de la filosofía de las ciencias y de la filosofía de la mente del siglo veinte. En el desarrollo de tales discusiones, se ha

establecido una suerte de jerga filosófica y de elementos básicos que se repiten tanto en diferentes disciplinas, como en diferentes modelos de reducción.

En un sentido mínimo y primordial, el concepto de reducción es un tipo de relación *formal* entre dos teorías científicas. Diferentes modelos de reducción caracterizan esta relación reductiva de diferentes maneras, requiriendo diversos elementos adicionales para poder definirla con claridad; en un sentido amplio, la reducción prueba la existencia de una *relación asimétrica* entre dos teorías científicas (Si la teoría A se reduce a la teoría B, entonces la teoría B no se reduce a la teoría A), y que una forma parte de la otra, $A \subset B$.

Existe una manera más o menos estandarizada de referir a teorías relacionadas por una relación de reducción. Esta jerga es, en general, consistente a lo largo de los diferentes modelos de reducción y de las disciplinas a las cuales se aplican (con una excepción que mencionaré más adelante). Cuando una teoría científica A *se reduce a* una teoría científica B, la teoría A es denominada la teoría *target,* T_t (o teoría *reducida* o teoría de *orden superior*), y la teoría B es denominada la teoría *basal*, T_b (o teoría *reductora* o teoría de *orden inferior*). Sin importar cómo sea caracterizada la relación de reducción, siempre involucra teorías de tipo T_t y T_b, o alguna modificación o extensión de ellas.

El arte de llevar a cabo un programa reductivo radica, casi exclusivamente, en generar un modelo de reducción que especifique de qué manera T_t y T_b se relacionan. Muchos modelos de reducción fueron en realidad partes de una cosmovisión más amplia de la actividad científica y de su relación con la filosofía, comprehendiendo una variedad significativa de compromisos epistémicos, metodológicos y metafísicos. Además, gozaron de vigencias temporales. Por ejemplo, el modelo de reducción como *traducción* tuvo cierta vigencia durante la década del veinte y del treinta, pero desapareció prácticamente de la escena filosófica en los años cincuenta. En los ochenta, primó un modelo de reducción *funcional*, desplazando un modelo de reducción *deductivo* que había reinado en las filosofías de las ciencias en los sesenta. En la actualidad, no es claro, al menos para mí, que exista algún tipo de modelo de reducción hegemónico; en su lugar, creo que prima una razonable actitud de reunir los mejores elementos de los viejos modelos de reducción, notando sus debilidades y fracasos, y resaltando sus virtudes y éxitos. Esta actitud es acompañada de una prudente búsqueda de reducciones parciales y locales, en lugar de perseguir grandes proyectos universalistas.

Cada modelo de reducción ha dado lugar a diferentes versiones que, para muchos/as, constituyen modelos distintos. En un capítulo introductorio no es posible entrar en tales detalles y para lograr una mejor comprensión y una visión panorámica conviene mantener las cosas lo más simples posibles. En esta sección distinguiré cinco modelos de reducción:

(a) el modelo de reducción por *traducción* (promovido por Otto Neurath y Rudolph Carnap en los años treinta)
(b) el modelo de reducción por *deducción* (defendido por Ernst Nagel, y modificado luego por Kenneth Schaffner en los sesenta
(c) el modelo de reducción por *paso al límite* (utilizado comúnmente en las ciencias físicas y tematizado por Thomas Nickles en los setenta),
(d) el modelo de reducción *funcional* (originalmente utilizado en filosofía de la mente en los años setenta y luego extendido a la filosofía de las ciencias, defendido por Jaegwon Kim, Michael Esfeld y Christian Sachse).
(e) el modelo de reducción promovido por la llamada '*New-Wave'* (una familia de modelos reduccionistas eliminativistas y mecanicistas, surgidos principalmente en los ochenta y noventa, gracias a Paul y Patricia Churchland y John Bickle).

En lo que sigue, explicaré brevemente cada modelo y referiré a literatura relevante para discusiones y análisis más pormenorizados.

3.1. El modelo de reducción como traducción

El modelo de reducción como traducción se originó en el seno del proyecto unificacionista y universalista del empirismo lógico europeo de los años treinta, de la mano de Carnap y Neurath. Y si bien hubo grandes proyectos reduccionistas en ciencias durante el siglo diecinueve (siendo el más icónico el intento de reducir la termodinámica a la mecánica estadística clásica por Ludwing Boltzmann y James Clark Maxwell), el modelo de reducción por traducción podría considerarse el primer modelo filosófico y normativo de reducción.

Un principio defendido con vehemencia por los representantes del empirismo lógico fue la idea de una ciencia unificada y cooperativa a gran escala. Para garantizar tal principio, era necesario generar un entendimiento común entre científicos de diferentes áreas y disciplinas que facilite la comunicación y la cooperación. Para ello, la idea de

reducción como traducción hizo hincapié en que el vocabulario y el conjunto de oraciones de diferentes teorías y disciplinas científicas pueda ser expresadas en términos de un *lenguaje universal común*. Carnap dice:

> science is a unity, [such] that all empirical statements can be expressed in a single language, all states of affairs are of one kind and are known by the same method. (Carnap 1934, p.32)

Que todas las afirmaciones científicas puedan reducirse a un lenguaje común no sólo posibilita vínculos de cooperación y unidad, sino también establece estándares intersubjetivos de corrección, explicación y predicción. Esto impulsaría fuertemente el progreso científico: la expresión del saber científico en un lenguaje común permitiría evaluar de una manera más natural la *coherencia* general del edifico científico mediante instancias particulares de confirmación a lo largo de todas las disciplinas y teorías. Éxitos locales tendrían repercusiones globales.

Una pregunta natural que este modelo debe enfrentar es, ¿cuál es ese lenguaje universal común? Se ha insistido en que tal lenguaje común debe ser el de la física, y que los promotores de este modelo defendieron esta idea. Esto probablemente se deba a cierta insistencia en privilegiar un lenguaje de objetos en el espacio-tiempo y, aunque el lenguaje de la física sería un buen candidato para ocupar el papel de tal lenguaje universal común, ni Carnap ni Neurath defendieron que ese sea necesariamente el caso. Recuérdese que el objetivo primordial de este modelo de reducción fue servir de herramienta teórica para promover y facilitar la cooperación científica a escala global, por lo que *cualquier lenguaje intersubjetivo* que sirva a tales fines serviría a tales propósitos.

3.2. Modelo de reducción por deducción

El modelo de reducción por *deducción* es probablemente el modelo más extendido en la comunidad de filósofos/as de la ciencia y es incluso considerado *el* modelo de reducción por antonomasia. Formulado originalmente por Ernst Nagel en 1961, este modelo tuvo tantos/as defensores/as como detractores/as en los últimos cincuenta años, pero ha sido indiscutiblemente un modelo de referencia a la hora de hablar de reducción, especialmente en filosofía de las ciencias. La idea del modelo *nageliano* (tal como también se lo conoce) es simple. En palabras del propio Nagel:

> A reduction is effected when the experimental laws of the secondary science (and if it has an adequate theory, its theory as well) are shown to be the *logical consequences* of the theoretical assumptions (inclusive of the coordinating definitions) of the primary science (1961, p.352. Énfasis mio).

El concepto clave en la reducción nageliana que apuntala qué tipo de relación entre teorías se busca es el de *consecuencia lógica* o *derivabilidad*:

T_t se reduce a T_b si y sólo si T_t se deriva de T_b más leyes puentes relevantes

Según Nagel, la teoría T_t es una teoría perteneciente a una ciencia secundaria, mientras que T_b pertenece a una ciencia primeria. La expresión 'se deriva de' ha de entenderse en el sentido lógico de derivación: mediante la aplicación de reglas de inferencia y tras una serie finita de pasos uno obtiene deductivamente T_t. Claramente, una noción central en la definición es la de 'leyes puentes', también denominadas 'reglas de correspondencia' o 'definiciones coordinadoras'. Las leyes no sólo permiten establecer los vínculos entre los vocabularios de ambas teorías, sino que también permite entender T_t como una *definición extensional* de T_b. Finalmente, vale la pena aclarar que la reducción nageliana debe entenderse también en términos *explicativos*: que T_t se reduzca a T_b conlleva la idea que T_b *explica* fenómenos descriptos por T_t. Este aspecto ha sido remarcado por otros filósofos que tomaron como base el modelo nageliano (ver Kemeny y Oppenheim 1956).

Hay dos aspectos importantes sobre los cuales vale la pena detenerse un momento para comprender los alcances y límites del modelo nageliano de reducción. El primero es que Nagel no creyó que *toda* reducción necesitaba una perfecta traducción de término a término entre dos teorías científicas. Según Nagel, existen dos tipos de reducciones: homogéneas y heterogéneas. La diferencia radica en que las reducciones homogéneas no requieren leyes puente, mientras que las heterogéneas, sí. El requerimiento de leyes puente depende, principalmente, de cuán semejante es el vocabulario no-lógico utilizado por dos teorías científicas: mientras más desemejante sea tal vocabulario, la necesidad de leyes puentes se hace más imperiosa.

El segundo aspecto concierne la naturaleza de las leyes puente. Nagel las describe como (i) conexiones analíticas o lógicas entre términos, aunque es claro que no se trata de una traducción como en el modelo anterior; como (ii) supuestos convencionales creados 'by fiat'; o como (iii) hipótesis empíricas (Nagel 1961, p. 354). En el marco de una concepción sintáctica de las teorías científicas, el modelo nageliano asume que una

reducción exitosa genera una relación en donde T_t es parte de T_b cuando los teoremas de T_t son un subconjunto de los teoremas de T_b. Sin embargo, tal como se mencionó en el punto anterior, el vocabulario no-lógico de ambas teorías es muchas veces disyunto, lo cual puede generar confusión en la manera de interpretar y vincular predicados entre ambas teorías. Ya sea en términos de (i), (ii) o (iii), las leyes puentes son definiciones que establecen *identidades* entre términos (ver Sklar 1967), las cuales generan una transición entre ambas teorías, donde T_t se vuelve una *extensión definicional* de T_b más el conjunto de definiciones D.

Más allá de la consistencia conceptual y formal del modelo nageliano, vale preguntarse, ¿captura adecuadamente nuestras preconcepciones respecto de qué es una reducción exitosa? ¿Captura el uso científico de la noción de reducción? ¿Pretende ser un enfoque normativo o meramente descriptivo? ¿Existen instancias de reducción entre teorías científicas que instancien el modelo nageliano? La literatura al respecto es muy amplia y es imposible revisarla aquí. A pesar de que el modelo fue duramente criticado fundamentalmente a partir de la década del setenta en adelante, vale la pena mencionar que no ha sido completamente abandonado y que ha sido perfeccionado sucesivamente en ese periodo. Pocos años después que Nagel propusiera su modelo de reducción, Kenneth Schaffner (1967) propuso un modelo alternativo basado en el modelo nageliano. El modelo de Schaffner (que luego pasó a ser conocido como el modelo *Nagel-Schaffner* y que en nuestros días se utiliza prácticamente como sinónimo de modelo de reducción como deducción) buscaba subsanar dos debilidades del modelo de Nagel:

(i) presuponía simple deducibilidad, y

(ii) presuponía invariancia conceptual.

Ambos presupuestos hacían que el modelo entrara en conflicto con casos actuales e históricos de reducción. La idea de Schaffner fue mostrar que, en sentido estricto, la reducción de T_t a T_b involucraba la reconceptualización y reformulación de la teoría T_t en términos de una teoría análoga T_t*. A su vez, muchas veces también resulta necesario llevar a cabo un procedimiento similar con la teoría T_b, por lo que la reducción implicaba, en algún sentido, el desarrollo de dos teorías nuevas, T_t* y T_b*.

El modelo Nagel-Schaffner tuvo una reformulación en un modelo de reducción propuesto por John Kemenny y Paul Openheim (1956) que resaltó la función *explicativa* de la reducción deductiva. La virtud principal de T_b es que sistematiza mejor

y explica más que T_t. Este hincapié en el concepto de sistematicidad balancea la búsqueda de simplicidad y parsimonia, por un lado, y la búsqueda de mayor poder explicativo, por el otro. En la actualidad, varios filósofos de la ciencia defienden el modelo Nagel-Schaffner con modificaciones y adaptaciones locales. Jeremmy Butterfield (2011) ha defendido la viabilidad del modelo Nagel-Schaffner de reducción, aunque en contextos donde la definición de teoría es clara y más específica. Foad Dizadji-Bahamani, Roman Frigg y Stephan Hartmann (2010) defienden una versión refinada del modelo nageliano de reducción, que combina aproximaciones, idealizaciones y métodos matemáticos diversos que se aplican de manera local. En consecuencia, proponen una versión *generalizada* del modelo Nagel-Schaffner que tiene amplia repercusión en nuestros días.

3.3. Modelo de reducción por paso al límite

En física, se suele hablar de la reducción de una teoría a otra en términos de 'ser un caso especial de'. Esta forma de reducción no parece compatible con el modelo Nagel-Schaffner: no se habla de derivabilidad, ni se requieren leyes puentes, ni identidades. Thomas Nickles (1972) advirtió esta inadecuación y sugirió que casos en los cuales la reducción se tomaba en términos de 'ser un caso especial de' implicaba un tipo especial de reducción, diferente del modelo nageliano. De esta manera, Nickles distingue la reducción tal como la entienden los filósofos (i.e. en términos deductivos) y la reducción tal como la entienden los físicos.

¿Qué implica este tipo de reducción? Nickles nota que radica principalmente en el uso de la relación matemática conocida como *paso al límite*: una teoría es un caso especial de otra cuando uno puede obtenerla en un límite dado. En este sentido, la reducción cumple el papel de preservación de dominio, y no de remplazo teórico ni de ganancia explicativa. Vale la pena notar que este tipo de reducción *invierte* los términos con respecto al modelo Nagel-Schaffner: es T_b (Nickles habla de teoría *sucesora*) la que se reduce a T_t (i.e. teoría predecesora) bajo ciertas operaciones de límite y transformaciones adecuadas.

El valor de este tipo de reducción radica en su papel heurístico y de justificación. El modelo de reducción como paso al límite enfatiza que la reducción no tiene por qué cumplir una función explicativa, sino que puede guiar el desarrollo de nuevas ideas y resultados teóricos en ciertas condiciones límites, que vinculan dominios teóricos diferentes, pero de alguna manera solapados. Un ejemplo clásico es el tipo de relación

entre la mecánica clásica newtoniana y la relatividad especial. En este caso, la relatividad especial (como teoría T_b) *se reduce* a la mecánica newtoniana (como teoría T_t) en el límite de velocidades bajas, es decir, cuando $v \rightarrow 0$. Si se toma la ecuación relativista para el momento, por ejemplo, resulta claro que tal ecuación *se reduce a* la ecuación clásica para momento cuando la velocidad de la luz tiende a cero. Es decir, una ecuación *más general* se reduce a una ecuación *especial* dado un cierto límite. Esto no implica que exista algún tipo de ganancia explicativa directa, ni que la ontología de una teoría sea más fundamental que la otra. Según este modelo, la reducción por paso al límite implica que una teoría más general ha preservado el dominio de la teoría más específica, y que es posible aplicarla en aquellos contextos donde la teoría predecesora se aplicaba, lo cual genera cierta continuidad teórica.

3.4. El modelo de reducción funcionalista

Al explicitar la naturaleza de las leyes puentes, Lawrence Sklar (1967) dijo que la temperatura *es* energía cinética media de las partículas componentes. Este es el sentido fuerte en el cual una ley puente establece una *identidad* entre propiedades de teorías a diferentes niveles. Sin embargo, algunos filósofos criticaron esta ida y consideraron que no sólo que las identidades no son suficientes para garantizar la reducción y obtener algún tipo de ganancia explicativa o sistematicidad, sino que el papel de las leyes puentes era arbitrario (ver Putnam 1967, Wimsatt 1974, Kim 1998, entre otros). Estas críticas promovieron una serie de modelos que, intentando salvar la idea de reducción (principalmente, la idea *fisicalista* de reducción), prescindieron de la idea leyes puentes o identidad de propiedades, al menos en el sentido nageliano. El modelo de reducción *funciona*l es una de las tantas propuestas que va en esta dirección, con un enfoque mucho más metafísico sobre propiedades, sus identidades y relaciones inter-niveles.

En sentido estricto, el modelo de reducción funcional es en realidad una familia de modelos, con diferencias relevantes pero una base común. El punto de partida es reconocer que muchas propiedades de teorías científicas de nivel superior (es decir, propiedades de T_t) son propiedades *funcionales* y requieren por lo tanto de una descripción funcional. Esto implica que la naturaleza de una propiedad funcional radica en una detallada caracterización del *rol* que la propiedad cumple en algún sistema en particular, lo cual a menudo se interpreta causalmente. Ahora bien, tales propiedades funcionales son *realizadas* (según algunos funcionalistas) por propiedades basales o

estructurales (pertenecientes a una teoríaT_b). La reducción funcional es, por lo tanto, la especificación del tipo de relación que existe entre propiedades funcionales de T_t y propiedades basales o estructurales de T_b que desempeñan su mismo rol funcional.

Un claro ejemplo de propiedades funcionales son los estados mentales, como por ejemplo 'sentir miedo'. Según el análisis funcional, tal propiedad se describe como estar en un estado que produce taquicardia, un deseo de escapar de una situación, etc. La reducción funcional busca establecer una relación reductiva entre tal propiedad y aquellas propiedades en un nivel basal que juegan el mismo papel dentro de un sistema. Los realizadores de la propiedad 'sentir miedo' son propiedades basales (por ejemplo, configuraciones neuroquímicas) que desempeñan su mismo rol funcional (producir taquicardia, un deseo de escapar de una situación, etc.). Todos los seres vivos que instancian la propiedad 'tener miedo' también instancian las propiedades basales funcionalmente relacionadas con ellas. Cualquier caso químico puede analizarse funcionalmente de la misma manera: la solubilidad puede analizarse funcionalmente en términos de sus realizadores a nivel molecular, y estos a su vez a nivel cuántico. Esto aseguraría un tipo de relación reductiva.

Naturalmente, esta descripción es igualmente compatible con distintas maneras de caracterizar esta relación entre propiedades funcionales y propiedades basales. Algunos han entendido que la relación se da en términos de *identidades* e interpretan la realización de un rol como la verdadera naturaleza de una propiedad, sugiriendo alguna clase de eliminativismo ('realizer functionalism', Lewis 1966, Armstrong 1968, Kim 1998). Otros, en cambio, sostienen que las propiedades funcionales no son idénticas a las propiedades basales (sus 'realizers'), sino que cumplen roles causales. Sus defensores no abogan por la eliminación de la propiedad funcional, defendiendo en cierta manera su estatus ('role functionalism', Putnam 1967, Fodor 1974, Loewer 2007). Finalmente, otros filósofos han sugerido que ambas vías conducen a grandes problemas filosóficos: la primera opción conduce al eliminativismo, la segunda al epifenomenalismo. En su lugar, proponen un enfoque reduccionista funcional en un marco nageliano donde las propiedades funcionales se pueden reducir a propiedades basales mediante sub-tipos funcionales (Esfeld y Sachse 2007).

Vale la pena aclarar que los modelos funcionales pertenecen a una categoría filosófica más amplia que excede los marcos de las discusiones en torno al reduccionismo científico, involucrando diversas tesis metafísicas y epistémicas. El punto es que tales

modelos han sido utilizados tanto para argumentar a favor de una posición reduccionista (como Kim 1998, y Esfeld y Sachse 2007), como para argumentar en contra (Putnam 1967, Wimsatt 1998). Sea como sea, los modelos funcionales de reducción han ocupado un lugar relevante en la filosofía de la mente y la filosofía de las ciencias desde principios de los ochenta. En nuestros días, modelos funcionales de reducción se han aplicado a diversos modelos neuronales así como también en relatividad (Knox 2017) y teorías de gravedad cuántica (Lam y Wüthrich 2018).

3.5. Modelos de reducción 'de la Nueva Ola' ('New wave-models')

Durante los años ochenta y noventa, un nuevo modelo de reducción se desarrolló principalmente en el ámbito de la filosofía de la mente y rápidamente se extendió a las filosofías de las ciencias –la 'Nueva Ola' reduccionista. Promovido principalmente por Paul Churchland (1981), Clifford Hooker (1981) Patricia Churchland (1986) y John Bickle (1998), los defensores de la Nueva Ola propusieron un modelo parcialmente basado en el modelo Nagel-Schaffner de reducción, pero con una impronta metafísica y eliminativista más radical.

La idea de este modelo es la siguiente. Supongamos que T_b es alguna teoría exitosa en neurociencias que describe redes y configuraciones neuronales, y T_t es una teoría psicológica acerca de estados mentales. La reducción de T_t a T_b se logra cuando dentro de T_b es posible construir una teoría análoga a T_t, T_t*, bajo ciertas condiciones C de manera tal que T_b *más* tales condiciones *implican* T_t*. Además, se postula una relación de *analogía* A entre T_t* y T_t que garantiza la semejanza entre teorías y permite hablar de reducción entre T_t y T_b. Nótese que, primero, T_b es una teoría más general y que las correcciones, adaptaciones y condiciones de contorno ('boundary conditions') se imponen dentro de T_b, no de T_t. Segundo, la reducción de acuerdo con este modelo es posible sin apelar a leyes puentes, un aspecto problemático en el modelo Nagel-Schaffner de reducción. No obstante, sí se apela a relaciones de analogía que, en algún sentido, juegan el papel de tales leyes. La diferencia central es que estás relaciones de analogía no son uniformes y habilitan transiciones tanto continuas y más conservativas, como más abruptas y eliminativistas. Finalmente, el modelo tiene una fuerte tendencia a resaltar aspectos metafísicamente eliminativistas en la reducción: de acuerdo con el modelo, teorías tipo T_b *reemplazan* y eliminan teorías T_t en todos los aspectos filosóficamente interesantes.

4. Dimensiones de los reduccionismos científicos

Hasta el momento he presentado algunos de los modelos de reducción más extendidos y discutidos en la bibliografía filosófica. Más allá de sus diferentes énfasis y la manera en que se resaltan diversos aspectos, en general es posible formularlos de manera tal que resulten compatibles con posturas proclives tanto al eliminacionismo teórico (u ontológico) como al conservadurismo. De la misma manera, algunos de estos modelos no implican, per se, compromiso alguno con un reduccionismo *ontológico*: bajo una posición instrumentalista de las teorías científicas, varios modelos de reducción tendrían igual vigencia y fuerza. Por ejemplo, muchos defensores del modelo nageliano de reducción resaltan que el modelo es *prima facie* formal, que busca relaciones lógicas entre diferentes teorías para lograr cierta unicidad y simplificación en el vocabulario teórico, pero que no presupone *per se* que una teoría deba ser reemplazada o eliminada en favor de otra, o que las entidades de las teorías reducidas tengan que ser consideradas como irreales o menos fundamentales (ver Butterfield 2011 por ejemplo).

Sin embargo, la discusión sobre reduccionismo en ciencias ha ido claramente mucho más allá de buscar relaciones lógicas, involucrando tesis filosóficas más fuertes y radicales. Y a menudo sí ha implicado posiciones ontológicas fuertes o propuestas de eliminacionismo teórico. En esta sección me gustaría resaltar estas diferencias y precisarlas. En primer lugar, debiéramos distinguir entre *reduccionismos conservativos* y *reduccionismos eliminativistas*. En segundo lugar, debiéramos distinguir entre *reduccionismo ontológico* y *reduccionismo teórico*.

4.1. Reduccionismo eliminativista y reduccionismo conservativo

A la base de cualquier modelo reduccionista, yace un fuerte espíritu unificacionista: donde existía una aparente diversidad, la reducción muestra que en realidad existe cierta identidad o unidad. Sin embargo, la unificación de teorías podría verse en dos sentidos. Por un lado, podríamos lograr unificación al integrar diferentes teorías científicas al distinguir teorías más generales y teorías más especiales, donde sus respectivos dominios se integren y se conserven. Pero también podríamos lograr unificación al eliminar teorías al obtener teorías más generales, más simples, más poderosas y más fundamentales. El primer sentido de reducción es típicamente asociado a un reduccionismo conservativo, mientras que el segundo sentido a un reduccionismo eliminativista.

El reduccionista conservativo no sostiene que podamos prescindir de las teorías de orden superior, ni tampoco que las propiedades o entidades de esas teorías no tengan estatus ontológico alguno. En caso de ser realista respecto de las teorías científicas, la reduccionista conservativa es realista tanto de las propiedades y entidades de T_t como de las de T_b. De la misma manera, las teorías de orden superior son (aproximadamente) verdaderas dentro de un cierto dominio, independientemente de si éstas tienen vínculos reductivos (por ejemplo, de deducción lógica) con teorías de orden inferior: la existencia de estos vínculos no torna a T_t en una teoría falsa o desechable. Contraria a esta posición, la reduccionista eliminativista busca la simplificación y unificación por eliminación: si los fenómenos descriptos por una teoría científica T_t no son nada más sino los fenómenos descriptos por una teoría T_b, ¿qué tipo de realidad científica tienen los fenómenos reducidos? ¿Por qué conservar las entidades y propiedades que T_t postula? En relación con esto, ¿qué ganancia teórico-epistémica provee T_t? El reduccionista eliminativista sólo se compromete con la verdad de T_b, con las entidades y propiedades que T_b postula y con los fenómenos en la manera en la que T_b los describe.

4.2. Reduccionismo ontológico y reduccionismo teórico

Si la idea general de reduccionismo científico en general consiste en lograr la unificación y simplicidad del edificio teórico de las ciencias, el reduccionismo ontológico asume la misma tarea a nivel de las propiedades y entidades que las teorías científicas postulan. Diferentes teorías en diferentes niveles describen fenómenos (e incluso los *mismos* fenómenos) haciendo uso de diferentes tipos de entidades y propiedades. La idea del reduccionismo ontológico es que las entidades de una teoría de nivel superior (perteneciente a la ontología de T_t) están constituidas por las entidades pertenecientes a la ontología de la teoría de nivel inferior (como T_b). La misma idea puede expresarse en términos de sus propiedades: las propiedades del nivel superior *supervienen* o son *metafísicamente idénticas* a las propiedades del nivel superior. Pensemos en la química molecular como una teoría de nivel superior T_t, donde su ontología está conformada principalmente por moléculas y sus propiedades (como, por ejemplo, su geometría o el tipo de enlace). El reduccionismo ontológico propone que las moléculas o bien supervienen sobre, o son idénticas a, al conjunto de entidades más fundamentales que las componen y que pertenecen a una teoría de orden inferior (por ejemplo, la mecánica

cuántica). No existe ganancia o novedad ontológica en T_t: todo lo que uno encuentra allí a nivel de entidades y propiedades, está metafísicamente incluido en T_b.

El reduccionismo teórico no se compromete con ningún tipo de reducción de entidades o propiedades de una teoría científica, sino con la reducción de sus oraciones y vocabulario no-lógico. Por ejemplo, cuando es posible obtener las leyes de una teoría T_t a partir de los principios de una teoría T_b.Este tipo de reducción teórica también es frecuentemente expresada en términos epistémicos o explicativos: los vínculos reductivos vinculan cuerpos de conocimientos o diferentes poderes explicativos.

5. Argumentos anti-reduccionistas

Tal como he mostrado en este artículo introductorio, 'reduccionismo' se dice de muchas maneras, donde los diferentes modelos surgieron como críticas a modelos anteriores (buena parte del modelo funcionalista surgió como una reacción al modelo Nagel-Schaffner). Estas críticas, en su mayoría, estuvieron dirigidas a aspectos puntuales de los diferentes modelos, sin renunciar al espíritu general. Por supuesto, esto condujo a multiplicar y perfeccionar los tipos de reduccionismos dentro de un marco común. Sin embargo, existe una corriente surgida en los años sesenta, y que ha crecido ininterrumpidamente desde entonces hasta nuestros días, que atacó el concepto de reduccionismo en sí mismo, e incluso su espíritu unificacionista. Estas críticas más profundas han pendulado entre un sistemático señalamiento de la inadecuación histórico-empírica de los modelos de reducción, hasta la objeción de sus bases mismas: la actividad científica y el mundo mismo son intrínsecamente irreducibles. A la luz de estas críticas, los diferentes reduccionismos adecuaron sustancialmente sus objetivos y pretensiones, lo cual redundó en modelos no sólo técnicamente más refinados, sino también más liberales y laxos. Para finalizar este artículo vale la pena centrarse en dos de las grandes críticas que han sido lanzadas contra diferentes formas de reduccionismos científicos. La primera es el argumento de la *realizabilidad múltiple* (o de las 'definiciones no-finitarias'). La segunda crítica es la del argumento de la *irreducibilidad intrínseca* de la actividad científica y del mundo natural.

5.1. Realizabilidad múltiple

El concepto de realizabilidad múltiple tiene su origen en discusiones en filosofía de la mente, en particular, en el ámbito de modelos funcionalistas de propiedades mentales y

su descripción en términos de sus realizadores basales (ver Putnam 1967, Fodor 1974). Sin embargo, la idea se extendió también a las filosofías de las ciencias especiales y es hoy en día un argumento usual contra cualquier postura reduccionista en ciencias. El argumento puede ponerse en los siguientes términos. Supongamos una propiedad mental como 'sentir miedo' como la que se describió anteriormente, la cual se *realiza* por medio de propiedades basales. El punto es que una propiedad funcional como 'sentir dolor' puede *realizarse* de muchas maneras, por medio de diferentes realizadores o propiedades o relaciones basales. De esta manera, el argumento desarticula cualquier identidad o relación reductiva entre propiedades funcionales y propiedades basales: cambios en las propiedades basales (es decir, diferentes modos de realización) conducen a la misma propiedad funcional.

El argumento fue comúnmente utilizado contra el modelo nageliano de reducción. Como mencioné en el apartado 3.3, el modelo de reducción Nagel-Schaffner depende fuertemente de proveer leyes puentes, interpretadas muchas veces como identidades: el vocabulario no-lógico de T_t tienen que *identificarse* con el vocabulario no-lógico de T_t. Pero, si una propiedad en T_t es múltiplemente realizada en T_b, su definición en términos de propiedades o relaciones basales de T_b podría ser una disyunción arbitrariamente larga. Esto socavaría, en principio, la función de las leyes puentes y la noción misma de extensión definicional, ya que no sería posible alcanzar una identidad entre ambos vocabularios. Se suele decir que el éxito de la reducción nageliana, y probablemente de otros tipos de reducciones, parecería exigir que las leyes puentes sean definiciones *finitarias*. El argumento de la realizabilidad múltiple mostraría que no lo son: diferentes propiedades basales podrían ser suficientes, aunque no necesarias, para el desempeño del rol funcional de la propiedad de orden superior. Kim consideró que este argumento vaciaba de contenido las leyes puentes de Nagel, ya que son conceptos primitivos sin explicación y, por lo tanto, filosóficamente vacíos e irrelevantes (1999, p.134; 2006, p. 552). Sin embargo, otros/as filósofos/as tomaron el reto y argumentaron que, en realidad, el argumento de la realizabilidad múltiple es o bien inocuo para el proyecto reduccionista nageliano (Sober 1999), o bien es compatible (Butterfield 2011).

5.2. *Una pluralidad irreducible*

Más allá de problemas conceptuales puntuales o casos de inadecuación histórico-empírica, el reduccionismo supone al menos que la actividad científica es unificable y,

más fuerte, que los fenómenos, las entidades y las propiedades del mundo natural son susceptibles de cierta unidad. Pero, ¿por qué deberíamos asumirlo? ¿Qué evidencia existe de que ese sea el caso? ¿Acaso no reina la pluralidad y la desunificación tanto en la actividad científica como en el mundo natural? ¿Por qué perseguir la unidad, la simplificación y la reducción a toda costa? Algunos/as filósofos han argumentado que no deberíamos. En su lugar, deberíamos reconocer que la pluralidad de teorías, modelos, metodologías e incluso ontologías es intrínsecamente irreducible: los supuestos reduccionistas son inaceptables y ejercen violencia contra tal irreducibilidad intrínseca. Argumentos en esta dirección han sido propuestos desde diversas posturas filosóficas, pero probablemente quienes hayan atacado directamente el corazón del reduccionismo (en todas sus vertientes y modelos) sean los llamados *pluralismos científicos*.

La idea central del pluralismo científico (ver, por ejemplo, Keller, Longino y Waters 2006) es que la pluralidad en la práctica científica, es decir, la pluralidad de teorías, modelos, leyes, métodos e incluso ontologías no es superflua, no puede unificarse por completo y guarda cierta irreducibilidad que le es inherente; tales rasgos son un aspecto positivo de la actividad científica y que uno debiera reconocer y promover, en lugar de eliminar. A la luz de esto, el reduccionismo no sólo desvirtúa la propia actividad científica, sino que promueve una imagen equivocada del mundo natural. Esta idea es compartida por casi todos los pluralismos científicos, aunque existen divergencias entre ellos. Estas divergencias, desde un punto de vista general, tienen que ver con hasta dónde extender las tesis pluralistas.

Algunos/as filósofos pluralistas han defendido un pluralismo de tipo *epistémico* al sostener que no es un objetivo de las ciencias la búsqueda de una teoría fundamental o de una verdad única, sino que su desarrollo es posible mediante el cultivo de múltiples sistemas científicos y líneas de investigación, con cánones de corrección y verdad inherentes: la verdad de una afirmación científica no está dada por una relación de correspondencia unívoca con el mundo externo, sino con el grado de coherencia que mantiene con otros enunciados dentro de una red o sistema de conocimiento. Hasok Chang (2012) ha defendido esta clase de pluralismo, principalmente en el ámbito de la química, tanto para mostrar su autonomía respecto de la física como para mostrar la pluralidad de teorías y metodologías que conviven en su interior.

El pluralismo epistémico de Chang, así como también otros pluralismos epistémicos, no se comprometen directamente con una defensa metafísica de la

pluralidad. En general, ponen el foco en aspectos semánticos o metodológicos de la actividad científica, y no en los aspectos ontológicos de las teorías. Sin embargo, han aparecido en la escena filosófica posiciones que extienden las tesis pluralistas a las ontologías de las teorías. Estos pluralismos *metafísicos* u *ontológico*s no sólo defienden que la actividad científica es irreducíblemente plural, sino que la naturaleza misma también lo es: la aparente multiplicidad de entidades, propiedades y relaciones que encontramos en el mundo no es, en absoluto, aparente, sino que es un rasgo intrínseco de una realidad plural (por ejemplo, Cartwright 1999, Dupré 1993).

Olimpia Lombardi y Ana Rosa Perez-Ransanz (2012) también han defendido un pluralismo ontológico de corte kantiano, con fuerte presencia en el ámbito de la filosofía de la química. De acuerdo con este pluralismo, no existe un mundo científico unificado, sino una multiplicidad de mundos. La idea de Lombardi y Perez-Ransanz es mostrar que las teorías científicas funcionan dentro de esquemas conceptuales que constituyen su propia ontología, a partir de conceptos históricamente desarrollados: uno no sólo encuentra diferentes esquemas conceptuales en la historia de las ciencias, sino también en la práctica científica actual. Entonces, cualquier intento de reducir una teoría a otra se vuelve una práctica inconducente, ya que presupone una unidad que trascendería todo marco conceptual, ontología y teoría. En esta línea, la química macroscópica es una teoría científica dentro de un esquema conceptual que no es ni más verdadera ni más falsa, ni menos ni más fundamental que la química cuántica: estas teorías pertenecen a esquemas conceptuales diferentes, y las entidades, propiedades y relaciones que cada teoría postula pertenecen a ontologías diferentes. Y es en este sentido que cualquier programa reduccionista está destinado al fracaso: no sólo no representa adecuadamente la actividad científica, sino que tampoco la manera en la que conocemos científicamente el mundo.

6. Conclusiones

En este capítulo he presentado una variedad de modelos reduccionistas desarrollados en la filosofía de las ciencias en el siglo veinte, en el marco de la motivación de unificar tanto la actividad científica como el mundo que describe. En la última parte he introducido dos críticas generales al proyecto reduccionista como tal, las cuales han impuesto serios límites a las posibilidades del sueño original de una ciencia universal, unificada y jerarquizada. Nuevos modelos y actitudes reduccionistas se han abierto paso por un camino más modesto, liberal, localista y laxo, sin renunciar a las virtudes de la unificación

y simplificación en nuestro entendimiento del mundo natural. Si no es posible una unificación universal, al menos su idea sirve como una heurística para la búsqueda de reducciones parciales y locales.

Referencias bibliográficas

Armstrong, D. (1968). *A materialist theory of the mind*. London: Routledge.

Bickle, J. (1998). *Psychoneural Reduction: The New Wave*. Cambridge, MA: MIT Press.

Butterfield, J. (2011). "Emergence, Reduction and Supervenience: A Varied Landscape", *Foundations of Physics* 41: 920–959.

Carnap, R. (1934). *The Unity of Science*. London: Kegan Paul, Trench, Trubner, and Co.

Cartwright, N. (1999). *The Dappled World: A Study of the Boundaries of Science*. Cambridge: Cambridge University Press.

Chang, H. (2012). *Is Water H2O?*. Oxford: Oxford University Press.

Churchland, P. (1981). "Eliminative Materialism and the Propositional Attitudes", *The Journal of Philosophy* 78: 67–90.

Churchland, P. (1986). *Neurophilosophy*. Cambridge, MA: MIT Press.

Dizadji-Bahmani, Frigg, R., y Hartmann, S. (2010). "Who is Afraid of Nagelian Reduction?", *Erkenntnis* 73: 393–412.

Dupré, J. (1993). *The Disorder of Things. Metaphysical Foundations of the Disunity of Science*. Cambridge, MA: Harvard University Press.

Esfeld, M. y Sachse, S. (2007). "Theory reduction by means of functional sub-types", *International Studies in the Philosophy of Sciences* 21: 1–17

Fodor, J. (1974). "Special Sciences: Or the Disunity of Science as a Working Hypothesis", *Synthese* 28: 97–115.

Hooker, C. (1981). "Towards a General Theory of Reduction. Part I: Historical and Scientific Setting. Part II: Identity in Reduction. Part III: Cross-Categorial Reduction", *Dialogue* 20: 38–59, 201–236, 496–529.

Kellert, S., Longino, H. y Waters, K. (2006). *Scientific Pluralism*. Minnesota: Minnesota Studies in the Philosophy of Science.

Kemeny, J. y Oppenheim, P. (1956). "On Reduction", *Philosophical Studies*, 7: 6–19.

Kim, J. (1998). *Mind in a Physical World. An Essay on the Mind-Body Problem and Mental Causation*. Cambridge, MA: Harvard University Press.

Knox, E. (2017). "Physical relativity from a functionalist perspective", *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 67: 118-124.

Lam, V. y Wüthrich, C. (2018). "Spacetime is as spacetime does". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 64: 39-51.

Lewis, David (1966). "An argument for the identity theory." *Journal of Philosophy* 63, pp. 17–25. Reprinted in D. Lewis (1983): *Philosophical papers. Volume 1*. Oxford: Oxford University Press, pp.99–107.

Loewer, B. (2007). "Mental causation, or something near enough." In: B. P. McLaughlin and J. Cohen (eds.): *Contemporary debates in philosophy of mind*. Oxford: Blackwell, pp.243–264.

Lombardi, O. y Perez-Ransanz, A. (2012). *Los múltiples mundos de las ciencias.* México: Fondo de Cultura Económica.

Nagel, E. (1961). *The Structure of Science. Problems in the Logic of Explanation*, New York: Harcourt, Brace & World, Inc.

Neurath, O. (1931). “Physicalism: The Philosophy of the Vienna Circle”, *The Monist*, 41: 618–623. Reprinted in R.S. Cohen, & M. Neurath (eds.), *Philosophical Papers 1913– 1946*, Dordrecht: D. Reidel Publishing Company, 1983, pp.48–51.
Nickles, T. (1972). “Two concepts of intertheoretic reduction”, *The Journal of Philosophy* 70: 181-201.
Putnam, H. (1967). “Psychological Predicates”, En: D. D. Merrill y W. H. Capitan (eds.), *Art, Mind, and Religion*, Pittsburgh: University of Pittsburgh Press, pp.37–48.
Schaffner, K. (1967). “Approaches to Reduction”, *Philosophy of Science* 34: 137–147.
Sklar, L. (1967). “Types of inter-theoretic reduction”, *British Journal for Philosophy of Science* 5: 464–482.
Sober, E. (1999). “The multiple realizability argument against reductionism”. *Philosophy of Science* 66, 542–564.
Wimsatt, W. (1976). “Reductive Explanation: A Functional Account”, En: G. Pearce, A. C. Michalos, C. A. Hooker y R. S. Cohen (eds.), *PSA: Proceedings of the Biennial Meeting of the Philosophy of Science Association*, 1974: 671–710.

CAPÍTULO 5

Relaciones entre química y física I: El problema de la naturaleza de los orbitales

Martín Labarca
CONICET – Universidad de Buenos Aires

1. Introducción

El problema de la relación entre química y física es el tópico de mayor madurez en la filosofía contemporánea de la química. Tradicionalmente, este problema ha sido discutido en el ámbito epistemológico sobre la base del análisis del concepto de reducción y su aplicación en las ciencias químicas. En este ámbito, entonces, existe acuerdo entre los filósofos de la química contemporáneos en rechazar la reducción epistemológica del mundo químico al mundo de la física de las partículas elementales: las leyes y conceptos de la química no pueden expresarse adecuadamente en el lenguaje mecánico-cuántico (*cfr.* por ejemplo, Primas, 1983; Scerri y McIntyre, 1997; Vemulapalli y Byerly, 1999; van Brakel, 2000; Scerri, 2004).

Sin embargo, las discusiones en el ámbito ontológico en general han tenido poca o ninguna influencia en la controversia: hasta hace poco tiempo, existía un amplio acuerdo respecto de que las entidades químicas no son más que entidades físicas (*cfr.*, por ejemplo, Kemeney y Oppenheim, 1956; Scerri y McIntyre, 1997; Vemulapalli y Byerly, 1999; Luisi, 2002). De este modo, la autonomía de la química como disciplina científica se respaldaba en el rechazo de la reducción epistemológica, pero admitiendo la reducción ontológica.

El objetivo del presente capítulo consiste en analizar el problema de la relación entre química y física concentrando la atención en un caso particular, ampliamente discutido: el caso de los orbitales atómicos. Para ello, el primer paso será repasar el marco general del debate que concierne con la relación histórica entre mundo químico y mundo físico. A continuación, recordaremos la diferencia en la interpretación que se brinda al concepto de orbital desde la química y desde la física, enfatizando la situación de confusión conceptual que ello genera. A continuación, expondremos el acalorado debate

desencadenado por la supuesta observación de orbitales atómicos. Sobre esta base, presentaremos entonces las principales posiciones filosóficas respecto de este problema.

2. El marco general del debate: la relación entre química y física

Hasta principios del siglo XX, la química siguió un desarrollo histórico independiente de la física: los fenómenos químicos eran concebidos en su propia especificidad y con sus propias regularidades (*cfr.* Nye, 1993). Sin embargo, con el arrollador éxito predictivo de la mecánica cuántica, durante el siglo XX la química queda marcada a fuego por el famoso dictum de Dirac, según el cual *"Las leyes físicas fundamentales necesarias para la teoría matemática de una gran parte de la física y la totalidad de la química [son] completamente conocidas desde la mecánica cuántica"* (Dirac, 1929, p.714). La afirmación de Dirac se considera habitualmente como el pronunciamiento más claro acerca de la derivabilidad de la química respecto de la física. Sin embargo, una afirmación anterior del físico Paul Langmuir en 1921 apenas se conoce, aunque expresa una posición aún más fuerte: *"Creo que dentro de unos pocos años vamos a ser capaces de deducir el 90 por ciento de todo lo que está en los libros de texto de química, deducirlo como usted lo necesite, desde principios ordinarios simples, conociendo hechos definidos en lo que se refiere a la estructura de los átomos"* (citado en Scerri, 1994, p.162). Esta visión adquirió rápidamente el estatus de un dogma, y fue adoptada por muchos autores que trabajan en los campos de la química, la física y la filosofía.

En la actualidad esta perspectiva continúa siendo ampliamente adoptada en el seno de la comunidad científica (*cfr.* por ejemplo, Bader, 2003). Desde luego, este enfoque reductivo atenta contra la autonomía de la química como disciplina científica o, al menos, la coloca en una posición subordinada respecto de la física: mientras que la física sería la ciencia 'fundamental' que representa la realidad tal como es en sí misma, la química resultaría una disciplina meramente 'fenomenológica' que sólo describe los fenómenos tal como se nos presentan.

Durante los últimos años, muchos filósofos de la química han comenzado a desafiar este enfoque tradicional con el propósito de recuperar la autonomía de la química y, en consecuencia, la legitimidad de la filosofía de la química. En algunos casos, la autonomía de la química como disciplina es defendida en términos históricos, enfatizando las diferentes tradiciones que marcaron la evolución histórica de la física y de la química (*cfr.* Vancik, 1999). Sin embargo, la línea de argumentación más frecuente es la que

enfatiza la imposibilidad de reducción epistemológica de la química a la física. Si bien los argumentos particulares difieren entre sí, los autores concuerdan en considerar que las descripciones y los conceptos químicos no pueden derivarse de los conceptos y las leyes de la física, tal como lo supone el reduccionismo epistemológico tradicional (*cfr*., por ejemplo, van Brakel, 2000, Cap. 5). En este sentido, Vemulapalli y Byerly (1999) sostienen que la reducción epistemológica falla incluso en casos relativamente sencillos: la relación interteórica sólo puede establecerse introduciendo datos específicamente químicos. Desde una perspectiva similar, Scerri y McIntyre concluyen que deberíamos "*renunciar a reducir epistemológicamente la química a la física*" (Scerri y McIntyre, 1997, p.220).

Sin embargo, a pesar del rechazo de la reducción epistemológica, la mayoría de los filósofos de la química siguen aferrados a la idea de una reducción ontológica de las entidades químicas a entidades físicas. Mientras algunos autores adoptan explícitamente una posición fisicalista (Vemulapalli y Byerly, 1999), otros consideran que la imposibilidad de reducción epistemológica se debe exclusivamente a nuestros limitados poderes de observación y cálculo (Benfey, 2000; Luisi, 2002). De este modo, si bien se preserva la autonomía de la química como disciplina científica, la reducción ontológica confina el mundo de la química al reino de lo meramente aparente o ilusorio:la realidad independiente estaría poblada sólo por las entidades y propiedades de la física fundamental; por el contrario, la forma o estructura molecular no sería más que una "*poderosa e iluminadora metáfora*" (Woolley, 1982, p.4).

En un ambiente dominado por las discusiones epistemológicas, algunos autores han abordado la cuestión ontológica sobre la base de alguna forma de emergentismo que rechaza la reducción ontológica del mundo químico: las entidades y propiedades químicas son objetivamente existentes puesto que 'emergen' a partir del nivel físico fundamental. Ya Broad (1925) proponía la noción de emergencia apelando a ejemplos de la química, tales como la emergencia del cloruro de potasio. El recurso a las nociones de emergencia o superveniencia reaparece en diversos autores. Por ejemplo, Bunge (1982) considera que la composición es una propiedad emergente que varía en el tiempo. Del mismo modo, Scerri y McIntyre (1997) se preguntan si la química superviene a la física analizando, en particular, la propiedad 'olor'. Por su parte, Hendry (2006) evalúa la posibilidad de causación descendente en química, mientras que Bishop (2005) considera que una

adecuada elucidación del concepto de emergencia permite vincular apropiadamente la mecánica cuántica y la química molecular.

En general, estas posiciones de corte emergentista se basan en un monismo fisicalista no reductivo que, no obstante, continúa admitiendo la prioridad ontológica del mundo físico respecto de los niveles emergentes. Por lo tanto, si bien el emergentismo no confina las entidades y propiedades químicas al reino de lo meramente ilusorio o 'metafórico', las dota de una existencia ontológicamente secundaria, en tanto derivada de la existencia de los ítems físicos. En otras palabras, se continúa estableciendo una relación de dependencia ontológica del dominio químico respecto del físico. Precisamente en este sentido Scerri y McIntyre (1997, p.18) consideran que "*la dependencia ontológica de la química respecto de la física parece ser casi un resultado inevitable*". En consecuencia, si bien el emergentismo no priva a la química de un ámbito de estudio propio, ubica a la disciplina en un lugar 'secundario' respecto de la física: mientras que la química se ocupa de entidades y propiedades derivadas o dependientes, la física estudia el nivel 'fundamental' y más profundo de la realidad, cuya prioridad ontológica es aquello que brinda existencia objetiva al nivel emergente de la química. De este modo, continúa admitiéndose la tradicional jerarquía de las ciencias naturales, que ubica a la física en el lugar de privilegio y considera a la química como una 'ciencia secundaria'.

3. El modelo atómico de Bohr

La analogía entre el sistema solar y la estructura del átomo, con un núcleo central y electrones orbitando a su alrededor, fue discutida por primera vez por el físico francés Jean Perrin en 1901. En 1903, Hantaro Nagaoka sugería un modelo al que denominó 'átomo saturniano', en el cual los electrones orbitaban alrededor del núcleo en una serie de anillos concéntricos (*cfr.* Scerri 2007). El célebre experimento de Lord Rutherford en 1910, donde se empleaban hojas delgadas de oro y otros metales como blanco de partículas α emitidas por una fuente radiactiva, respaldó el modelo 'planetario' del átomo.

Mediante los incipientes conceptos cuánticos, en 1913 Niels Bohr empleó la noción de 'órbitas atómicas' en su teoría del átomo de hidrógeno. Nacía el célebre *átomo de Bohr*: un núcleo cargado positivamente rodeado de electrones negativos dispuestos en órbitas concéntricas y capaces de 'saltar' entre las distintas órbitas por emisión o absorción de energía luminosa. Sobre la base de este modelo, Bohr brindó una explicación

aproximada de la disposición de los elementos en la tabla periódica apelando a las órbitas electrónicas para átomos multielectrónicos (para mayores detalles, *cfr*. Scerri 2007).

Si bien el modelo atómico de Bohr fue un eslabón histórico muy importante para el desarrollo de la mecánica cuántica, pronto comenzó a mostrar inconsistencias teóricas cuando se lo aplicó, entre 1913 y 1925, a átomos multielectrónicos y a moléculas. La formulación definitiva de la mecánica cuántica a fines de la década de 1920, de la mano de Schrödinger, Heisenberg, Born y von Neumann entre otros, modificó sustancialmente la concepción inicial de los electrones en el átomo: ahora los electrones se disponían alrededor del núcleo en tres dimensiones. Además, según el principio de indeterminación de Heisenberg, los electrones dejaron de concebirse orbitando alrededor del núcleo en trayectorias definidas: se comienza, así, a hablar de 'orbitales' en lugar de órbitas. Robert Mulliken, en su discurso de aceptación del premio Nobel de Química en 1966, lo describía así: *"Un orbital significa, aproximadamente, algo como una órbita o, más precisamente, algo semejante a una órbita tanto como es posible en mecánica cuántica"* (Mulliken, 1967, p.13).

Al imponerse definitivamente la mecánica cuántica en la comunidad científica, los físicos acabaron abandonando el modelo 'pictórico' del átomo para adoptar una descripción puramente formal en términos de los elementos teóricos de la teoría cuántica. Los químicos, en cambio, retuvieron la idea de electrones en torno al núcleo en ciertas disposiciones espaciales que permitían explicar los enlaces químicos y la forma molecular. De este modo, se produce la ruptura conceptual entre la descripción física y la descripción química del átomo (Labarca y Lombardi, 2010a,b).

4. La descripción cuántica del átomo

La descripción física del átomo se basa en la ecuación fundamental de la mecánica cuántica, la ecuación de Schrödinger, que en su versión independiente del tiempo se expresa como:

$$H\Psi = E\Psi \qquad (1)$$

donde H es el operador hamiltoniano que representa la energía total del sistema, E representa los valores de la energía total, autovalores de H, y Ψ es la función de onda

que representa el estado del sistema y que, en el caso de la descripción de los electrones en el átomo, se expresa en coordenadas espaciales.

Para los átomos hidrogenoides (aquéllos formados por un electrón y Z protones, como el H o los iones He^{+}, Li^{2+} o Be^{3+}) la ecuación toma la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(\boldsymbol{r})}{d\boldsymbol{r}}+V(\boldsymbol{r})\,\Psi(\boldsymbol{r})=E\,\Psi(\boldsymbol{r}) \qquad (2)$$

donde $\hbar = h/2\pi$ (con h: constante de Planck), $\boldsymbol{r}$ es el vector posición del electrón, m es su masa y $V(\boldsymbol{r})$ es la energía potencial coulombiana generada por el núcleo. Para este tipo de átomos, la ecuación tiene solución analítica, la cual consiste en una ecuación de onda Ψ expresada en coordenadas polares esféricas (r,θ,ϕ) y caracterizada por tres números cuánticos n, l y m:

$$\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi)=R_{n,l}(r)\,\Theta_{l,m}(\theta)\,\Phi_m(\phi) \qquad (3)$$

En los átomos hidrogenoides, entonces, la función de onda es factorizable en un factor radial $R_{n,l}(r)$ y un factor angular $\Theta_{l,m}(\theta)\,\Phi_m(\phi)$. El número cuántico principal n proporciona los niveles de energía permitidos del electrón en el átomo; el número cuántico l indica los valores permitidos del momento angular total del electrón, mientras que el número cuántico m indica los valores posibles de la componente z del momento angular total.

Sobre esta base se definen los estados posibles del electrón en un átomo hidrogenoide. Para $n=1$ y $l=m=0$, la función de onda se expresa:

$$\Psi_{1,0,0}(r)=\sqrt{\frac{1}{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \qquad (4)$$

donde a_0 es el radio de Bohr. En este caso la función de onda tiene simetría radial, y expresa el estado del electrón en el menor nivel de energía. Otra solución de la ecuación de Schrödinger corresponde a $n=2$ y $l=m=0$:

$$\Psi_{2,0,0}(r) = \frac{1}{4}\sqrt{2\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \qquad (5)$$

También en este caso la función de onda tiene simetría esférica. Esta simetría se pierde en el caso $n=2$, $l=1$ y $m=0$, donde Ψ comienza a presentar dependencia angular:

$$\Psi_{2,1,0}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{4}\sqrt{2\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r\, e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \operatorname{sen}\theta \cos\phi \qquad (6)$$

De este modo, para las diferentes combinaciones de valores de los números cuánticos n, l y m se obtienen las distintas funciones de onda que representan los estados admisibles del electrón en un átomo hidrogenoide.

Para átomos multielectrónicos, la solución de la ecuación de Schrödinger en su forma general es imposible por vía analítica. Por ello, para resolverla se utilizan diferentes técnicas, siendo la más corriente el método de Hartree-Fock. Este método consiste en partir del supuesto de que la función de onda del conjunto de electrones es 'separable', esto es, puede expresarse como producto de las funciones de onda para cada electrón individual. Este supuesto inicial equivale a despreciar las interacciones de los electrones entre sí y considerar el estado de cada electrón como independiente de los restantes. Para tomar en cuenta los efectos medios de las interacciones, en un segundo paso se usan todas las funciones de onda electrónicas calculadas previamente, salvo una, para calcular el potencial que afecta al electrón excluido y recalcular así su función de onda. Esta nueva función de onda se agrega al conjunto de funciones que, nuevamente, se utiliza para calcular la función de onda de otro electrón. El proceso se repite hasta que no se obtiene un cambio significativo entre una iteración y la siguiente.

Si bien el método de Hartree-Fock toma en consideración los efectos promedio de las interacciones entre electrones, la función de onda resultante continúa siendo un producto de funciones de onda de electrones individuales, que ignora los efectos instantáneos de las interacciones electrónicas. Para considerar tales efectos se utilizan otras técnicas más complejas, que desembocan en la imposibilidad de adjudicar números cuánticos a los electrones individuales: la función de onda del sistema de electrones en el átomo deja de ser separable en términos del producto de los electrones componentes.

Hasta aquí hemos recordado resumidamente el modo en que se aborda actualmente la descripción del átomo en términos de la mecánica cuántica. Veamos ahora cómo la física y la química 'leen' estos resultados desde sus propios marcos conceptuales.

5. El concepto de orbital en química y en física

La química recoge el formalismo cuántico para describir el átomo, pero retiene el concepto de orbital a través de la regla de Born, según la cual el cuadrado de la función de onda representa una probabilidad. En un sistema de N partículas cuyas posiciones vienen dadas por los vectores $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N$, el estado queda representado por la función de onda $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$: según la regla de Born, el cuadrado de dicha función, $\left|\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)\right|^2$, representa la probabilidad de que la partícula 1 se encuentre en la posición $\boldsymbol{r}_1$, la partícula 2 en la posición $\boldsymbol{r}_2$, ..., y la partícula N en la posición $\boldsymbol{r}_N$.

Sobre esta base, en química se concibe un orbital atómico como la *región del espacio* en la cual es más probable que se encuentren los electrones en un átomo (tomando, en general, la cota del 90-95% para fijar un límite arbitrario a dicha región). Así, en los átomos hidrogenoides la función de onda $\Psi_{1,0,0}(r)$ se hace corresponder al orbital *s* y suele designarse como Ψ_{1s}; análogamente, $\Psi_{2,0,0}(r) = \Psi_{2s}$ se hace corresponder al orbital 2*s* y $\Psi_{2,1,0}(r) = \Psi_{2p_x}$ al orbital $2p_x$. Estos orbitales son los que suelen representarse esquemáticamente mediante los conocidos diagramas que aparecen en todos los libros de texto.

Desde esta perspectiva, un orbital atómico es una región del espacio que, si bien estrictamente posee bordes difusos, tiene una forma definida. Es precisamente la estructura geométrica del orbital atómico aquello que, en química, explica el modo en que los átomos se unen entre sí a través de los enlaces químicos dando lugar a moléculas con una forma o estructura geométrica definida. A su vez, la forma o estructura molecular cumple un papel central en la comprensión de ciertas propiedades macroscópicas de las sustancias, como su reactividad y sus manifestaciones en espectroscopía. La enorme utilidad teórica del concepto de orbital atómico en química explica el hecho de que, en general, los químicos sean realistas respecto del concepto, esto es, atribuyan al orbital atómico una existencia real.

En física, en cambio, el concepto de orbital ha perdido su referente objetivo. En los textos de física o de química cuántica, el orbital atómico suele ser definido como la función de onda de un átomo monoelectrónico. En consecuencia, el concepto de orbital es concebido desde una perspectiva instrumentalista, como una mera herramienta matemática que carece de referente: su utilidad reside únicamente en permitir calcular el estado de los electrones en el átomo, en general a través de importantes aproximaciones.

La diferencia que presenta el concepto de orbital en química y en física puede parecer un detalle menor que sólo da pie a discusiones filosóficas desconectadas con la práctica científica. Sin embargo, éste no es el caso: en la medida en que el desacuerdo no apunta a una cuestión meramente epistemológica sino a un problema ontológico, el debate acerca de la existencia o inexistencia de los orbitales condujo a una tensión en el ámbito científico que no tardaría en estallar.

6. El problema de la interpretación del concepto de orbital atómico

En septiembre de 1999, la prestigiosa revista *Nature* anunciaba que los orbitales *d* de la cuprita (Cu_2O) habían sido observados y fotografiados por primera vez (Zuo *et al.*, 1999a). Naturalmente, el impacto de tal anuncio conmovió a las comunidades física y química (*cfr.* por ejemplo, Samuelson, 1999; Yam, 1999; Zurer, 1999b). Poco tiempo después, la visualización de orbitales en otro compuesto fue comunicada por otro grupo experimental (Pascual *et al.*, 2000).

Algunos libros de texto no tardaron en reproducir las fotografías obtenidas en los experimentos, como confirmación experimental de las predicciones teóricas (Tinoco *et al.*, 2002). Pero la euforia inicial ante esta noticia que manifestaron investigadores de prestigiosas universidades (*cfr.* Humphreys, 1999) fue rápidamente impugnada por los argumentos esgrimidos por algunos químicos teóricos y filósofos de la química. Entre ellos, Eric Scerri (2000a, 2001) rápidamente señaló el supuesto error conceptual cometido en la interpretación de las visualizaciones: el término 'orbital' carece de referente en mecánica cuántica. Por tanto, los orbitales no pueden ser observados. El error conceptual, señala el autor, consistió en confundir el concepto de orbital con el concepto de densidad de electrones, el cual, efectivamente, sí se observa durante los experimentos. Frente a esta objeción, el investigador líder del equipo que comunicó tal anuncio concedió a Scerri dicha interpretación: cualquier similitud entre las imágenes comunicadas y las imágenes de los orbitales en los libros de texto es completamente fortuita (Spence *et al.*, 2001). Al

mismo tiempo, algunas objeciones algo diferentes a dicha comunicación fueron formuladas por algunos químicos teóricos (Wang y Schwarz, 2000; Schwarz, 2006) y la no existencia de los orbitales fue enfatizada por químicos teóricos no-cuánticos (Matta y Gillespie, 2002), así como también por filósofos (Jenkins, 2003).

Este debate es una manifestación de un problema que tiene profundas consecuencias para la enseñanza de la química, ya que los docentes de la disciplina no pueden prescindir del concepto de orbital en su enseñanza. Algunos autores han señalado que esta posición choca con el supuesto según el cual la mecánica cuántica tiene la última palabra sobre el tema: sólo el concepto de función de onda es legítimo; el término 'orbital' no tiene ninguna referencia en el mundo real. En particular, el punto de vista realista sobre los orbitales adoptado por los profesores de química resulta ser incompatible con su propia posición cuando introducen la mecánica cuántica como la teoría explicativa subyacente de los fenómenos químicos. Este problema es explícitamente señalado por Scerri (2000b) cuando planteó la pregunta: *"¿Pueden los orbitales ser reales en química pero no en física?"*. Parece bastante claro que esta situación paradójica tiene consecuencias negativas para una profunda comprensión de la disciplina, al menos, por las siguientes razones: a) los estudiantes se enfrentan a la alternativa de vivir en una especie de 'esquizofrenia conceptual' o aceptar que la química describe fenómenos meramente aparentes o 'metafóricos'; y b) si la definición 'correcta' del concepto de orbital atómico sólo radica en el campo de la física, los estudiantes que deciden estudiar química encontrarían que los libros de texto de su propia disciplina brindan una definición 'incorrecta' del concepto. Esta situación parece ser también problemática desde el punto de vista pedagógico.

Como era de esperar, algunos educadores en química han reaccionado frente a este enfoque normativista, señalando que la interpretación no realista tendría muy poco impacto en la utilización de los orbitales en la enseñanza de la disciplina (Richman, 1999a, b; Emerson, 1999). A partir de ésta y otras críticas, Scerri comenzó a mitigar su posición, adoptando una 'posición intermedia' entre normativismo y naturalismo: si bien los orbitales no pueden ser observados de acuerdo con la mecánica cuántica, los educadores pueden emplearlos de manera realista, pero señalando cuidadosamente sus limitaciones (Scerri, 2006).

La enorme utilidad teórica del concepto de orbital en química explica el hecho de que, en general, los químicos y los docentes de la disciplina sean realistas en relación al

concepto, es decir, los orbitales son entidades existentes en el mundo. Como afirma Roald Hoffman, Premio Nobel de química en 1981: *"Creo que los orbitales son reales y que a partir de ellos podemos construir el mundo de la química. Son la manera más extensiva y unificadora de observar los fenómenos químicos"* (citado en Cardellini, 2007, p.1633).

Cuando el debate filosófico-científico parecía estar teóricamente definido en favor de la interpretación antirrealista (es decir, la no-observación de los orbitales), diversos grupos experimentales continuaron reportando su visualización y aun la de orbitales moleculares (cfr. por ejemplo, Feng *et al.*, 2000; Litvinyuk *et al.*, 2000; Brion *et al.*, 2001; Itatani *et al.*, 2004).

Si hasta el momento de las primeras noticias la discrepancia acerca del significado del término 'orbital' podía continuar confinada al plano epistemológico, en particular en el ámbito de la educación en química (Ogilvie, 1990; Simons, 1991; Edminston, 1992; Pauling, 1992), con el anuncio de la observación de orbitales la discusión ingresaba decididamente en el terreno ontológico. Ya no se trata de establecer el papel explicativo del concepto de orbital, la posibilidad de su descripción en términos mecánico-cuánticos, o su utilidad en la enseñanza: ahora el problema se convierte en la cuestión de decidir si los orbitales existen o no.

Eric Scerri (2001) adopta una posición clara respecto del problema. Según el autor, los experimentos comunicados como visualización de orbitales han sido incorrectamente interpretados puesto que los orbitales no son observables. Y tal inobservabilidad no depende de limitaciones empíricas sino del simple hecho de que el término 'orbital' carece de referencia: estrictamente, los orbitales *no existen*.

Los motivos de Scerri para tan drástica conclusión se apoyan en dos líneas argumentativas. El primer argumento parte de recordar las aproximaciones necesarias para la descripción de átomos multielectrónicos en términos de los orbitales de los electrones individuales: puesto que en estos casos la función de onda no es factorizable en las funciones de onda de los electrones componentes, estrictamente no es posible adjudicar números cuánticos definidos a cada electrón en forma independiente. Por ello, Scerri considera que la utilidad de los orbitales consiste únicamente en brindar una base en la cual la función de onda se expresa matemáticamente, con el grado de precisión permitido por el poder de cómputo disponible al momento (Scerri, 2001, p.S79).

El segundo argumento, considerado por el propio autor como el más decisivo, se basa en el hecho de que, según la mecánica cuántica, los electrones carecen de una trayectoria definida: su función de onda no describe su trayectoria sino que permite calcular una distribución de probabilidad. En consecuencia, si se admite que un orbital es una función de onda, entonces los orbitales son inobservables en principio, puesto que la función de onda es una magnitud imaginaria (que incluye el número imaginario $i = \sqrt{\ 1}$). Sobre esta base, Scerri concluye que "*sólo puede observarse el cuadrado de un orbital atómico y no el orbital atómico mismo*" (Scerri, 2001, p.S87). Ambos argumentos, formulados también por otros autores (Wang y Schwarz, 2000), apuntan en la misma dirección: impugnar la existencia efectiva de los orbitales atómicos.

Labarca y Lombardi (2010a, b) han analizado el problema del concepto de orbital a la luz de los argumentos que niegan su carácter referencial desde el punto de vista ontológico. Su punto de partida fue analizar la relación entre mecánica cuántica y química molecular. Mientras que en mecánica cuántica 'orbital' refiere a la función de onda de un electrón, en química molecular el término 'orbital' refiere a la región de mayor densidad electrónica (típicamente, con una probabilidad del 90%), lo cual explica la forma de las moléculas locales e individuales. El argumento para rechazar la existencia de orbitales, señalan los autores, se basa en una premisa fundamental: la identificación entre 'orbital' y 'función de onda'. Los autores ponen en cuestión tal identificación preguntándose entonces si éste es el concepto de orbital utilizado en química para hablar de las formas de los orbitales o para explicar el enlace químico.

La distinción conceptual señalada implica la profunda ruptura ontológica entre los dos dominios. La *contextualidad cuántica*, esto es, la imposibilidad de asignar de un modo consistente un valor preciso a todos los observables de un sistema que se encuentra en un cierto estado cuántico (Kochen y Specker, 1967), así como la indistinguibilidad de las 'partículas elementales' que conduce a las peculiares estadísticas cuánticas (*cfr.* French y Krause, 2006) ponen en crisis la noción filosófica tradicional de *objeto individual*, que posee todas su propiedades determinadas y que preserva su identidad a través del cambio. Por otra parte, la *no-localidad* cuántica (Einstein, Podolsky y Rosen, 1935) impide considerar a un sistema cuántico con independencia de las correlaciones cuánticas -debidas al entrelazamiento (*entanglement*) que mantiene con otros sistemas cuánticos con los que ha interactuado, aun cuando tales interacciones hayan cesado en el presente-, y con ello desafía la noción tradicional de *objeto local*, esto es, que puede

identificarse por su localización espacial definida. La química, en cambio, utiliza nociones clásicas o semi-clásicas para caracterizar a sus objetos: la molécula es concebida como un objeto individual, compuesto de núcleos clásicos espacialmente localizados, y electrones que resultan ser semi-clásicos ya que, si bien son individuos con ubicaciones espaciales definidas, su movimiento no se encuentra regido por las ecuaciones clásicas sino por la ecuación de Schrödinger bajo su interpretación gnoseológica. Cada átomo es, entonces, un objeto individual (el núcleo) espacialmente localizado, compuesto de otros objetos individuales (los electrones) que se disponen a su alrededor de un modo que la teoría determina sólo probabilísticamente. Lejos de considerar esta ruptura como un síntoma de las limitaciones de la descripción semi-clásica que brinda la química y, con ello, concluir la inexistencia de los orbitales, Labarca y Lombardi adoptan un pluralismo ontológico (*cfr.* para mayores detalles, véase el Capítulo 4 de este libro) que les permite admitir la existencia de los orbitales en la ontología química molecular y, al mismo tiempo, su inexistencia en la ontología cuántica.

7. Conclusiones

En este capítulo hemos analizado el complejo problema de la relación entre química y física, concentrando la atención en un caso de estudio ampliamente discutido y que concierne con la naturaleza de los orbitales atómicos, una noción relevante en la ciencia química. Expusimos entonces el marco general del debate relacionado con la extensa relación histórica entre mundo químico y mundo físico. A continuación, recordamos la diferencia en la interpretación que se brinda al concepto de orbital desde la química y desde la física y, sobre esta distinción, la situación de confusión conceptual que se genera. El debate acerca de la visualización nos condujo finalmente a exponer las principales posiciones filosóficas respecto de este problema.

Sin duda, los supuestos metafísicos reduccionistas continúan impregnando fuertemente, explícita o implícitamente, las opiniones que predominan en el ámbito científico e incluso en el contexto de la filosofía de la química; desde esta perspectiva, sólo el concepto de función de onda es legítimo; el término ‘orbital’ no tiene ninguna referencia en el mundo real. Pero, asimismo, desde un marco filosófico ontológicamente pluralista, no comprometido con el reduccionismo ontológico tradicional, es posible admitir la existencia de los orbitales en un dominio químico molecular y su inexistencia en un dominio de partículas elementales.

Referencias bibliográficas

Bader, R. F. W. (2003). "Letter to the editor: quantum mechanics or orbitals?". *International Journal of Quantum Chemistry* 94: 173–177.

Benfey, T. (2000). "Reflections on the philosophy of chemistry and a rallying call for our discipline". *Foundations of Chemistry* 2: 195–205.

Bishop, R. (2005). "Patching physics and chemistry together". *Philosophy of Science* 72: 710–722.

Brion, C. E., Cooper, G., Zheng, Y., Litvinyuk, L. V. y McCarthy, I. E. (2001). "Imaging of orbital electron densities by electron momentum spectroscopy – A chemical interpretation of the binary (*e*, 2*e*) reaction", *Chemical Physics* 70: 13–30.

Broad, C. D. (1925). *The mind and its place in nature*. London: Routledge and Kegan Paul.

Bunge, M. (1982). "Is chemistry a branch of physics?". *Zeitschrift fur allgemeine Wissenschaftstheorie* 13: 209–223.

Cardellini, L. (2007). "Looking for connections: An interview with Roald Hoffman". *Journal of Chemical Education* 84: 1631–1635.

Dirac, P. A. M. (1929). "Quantum mechanics of many-electron systems". *Proceedings of the Royal Society* A338: 714–733.

Edminston, C. (1992). "The nature of the chemical bond-once more". *Journal of Chemical Education* 69: 600.

Einstein, A., Podolsky, B. y Rosen, N. (1935). "Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?". *Physical Review* 47: 777–780.

Emerson, K. (1999). "The quantum mechanical explanation of the periodic system". *Journal of Chemical Education* 76: 1189.

Feng, R., Sakai, Y., Zheng, Y., Cooper, G. y Brion, C. E. (2000). "Orbital imaging for the valence shell of sulphur dioxide: Comparison of EMS measurements with near Hartree-Fock limit and density functional theory". *Chemical Physics* 260: 29–43.

French, S.; Krause, D. (2006). *Identity in Physics: A Historical, Philosophical and Formal Analysis*; Oxford University Press: Oxford.

Hendry, R. (2006). "Is there downward causation in chemistry?" En: Baird, D., Scerri, E. y McIntyre, L. (eds.). *Philosophy of Chemistry: Synthesis of a New Discipline*, The Netherlands: Boston Studies in the Philosophy of Science, Springer, pp.173–189.

Hettema, H. (2012). *Reducing Chemistry to Physics: Limits, Models, Consequences*. Groningen: Rijksuniversiteit Groningen.

Humphreys, C. J. (1999). "Electron seen in orbit". *Nature* 401: 49–52.

Itatani, J., Levesque, J., Zeidler, D., Niikura, H., Pépin, H., Kieffer, J. C., Corkum, P. B. y Villeneuve, D. M. (2004). "Tomographic imaging of molecular orbitals". *Nature* 432: 867–871.

Jenkins, Z. (2003). "Do you need to believe in orbitals to use them? Realism and the autonomy of chemistry". *Philosophy of Science* 70: 1052–1062.

Kemeney, J. G. y Oppenheim, P. (1956). "On reduction". *Philosophical Studies* 7: 6–19.

Kochen, S. y Specker, E. (1967). "The problem of hidden variables in quantum mechanics". *Journal of Mathematics and Mechanics* 17: 59–87.

Labarca, M.; Lombardi, O. (2010a). "Why orbitals do not exist?". *Foundations of Chemistry* 12: 149–157.

Labarca, M.; Lombardi, O. (2010b). "Acerca del estatus ontológico de las entidades químicas: El caso de los orbitales", *Principia – An International Journal of Epistemology* 14: 309–333.

Litvinyuk, I. V.; Zheng, Y. y Brion, C. E. (2000). "Valence shell orbital imaging in adamantane by electron momentum spectroscopy and quantum chemical calculations". *Chemical Physics* 253: 41–50.

Lombardi, O. (2013). "¿Acerca de qué nos habla la química? Nuevos argumentos en favor de la autonomía ontológica del mundo químico", *Revista Colombiana de Filosofía de la Ciencia* 13: 105–144.

Lombardi, O.; Labarca, M. (2007). "The philosophy of chemistry as a new resource for chemistry education". *Journal of Chemical Education* 84: 187–192.

Luisi, P. L. (2002). "Emergence in chemistry: Chemistry as the embodiment of emergence". *Foundations of Chemistry* 4: 183–200.

Matta, C. F. y Gillespie, R. J. (2002). "Understanding and interpreting molecular electron density distributions". *Journal of Chemical Education* 79: 1141–1152.

Mulder, P. (2010). "On the alleged non-existence of orbitals". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 41: 178–182.

Mulder, P. (2011). "Are orbitals observable?". *Hyle - International Journal for Philosophy of Chemistry* 17: 24–35.

Mulliken, R. (1967). "Spectroscopy, molecular orbitals, and chemical bonding". *Science* 3784: 13–24.

Nye, M. J. (1993). *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry – Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines 1800-1950.* Berkeley: University of California Press.
Ogilvie, J. F. (1990). "The nature of the chemical bond-1990: There are no such things as orbitals!". *Journal of Chemical Education* 67: 280–289.
Pascual, J. I., Gómez-Herrero, J., Rogero, C., Baró, A. M., Sánchez-Portal, D., Artacho, E., Ordejón, P. y Soler, J. M. (2000). "Seeing molecular orbitals". *Chemical Physical Letters* 321: 78–82.
Pauling, L. C. (1992). "The nature of the chemical bond-1992". *Journal of Chemical Education* 69, 519–521.
Primas, H. (1983). *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism.* Berlin: Springer.
Richman, R. (1999a). "In defense of quantum numbers". *Journal of Chemical Education* 76: 608.
Richman, R. (1999b). "The use of one-electron quantum numbers to describe polyatomic Systems". *Foundations of Chemistry* 1: 175–183.
Samuelson, A. G. (1999). "Visualizing orbitals and bonds". *Current Science* 77: 1131–1132.
Scerri, E. R. (1994). "Has chemistry been at least approximately reduced to quantum mechanics?". D. Hull, M. Forbes y R. Burian (eds.), *Proceedings of the Philosophy of Science Association*, Chicago: Philosophy of Science Association, Volumen 1, pp.160-170.
Scerri, E. R. (2000a). "Realism, reduction and the 'intermediate position'". En Bhushan, N. y Rosenfeld, S. (eds.), *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*, New York: Oxford University Press, pp.51–72.
Scerri, E. R. (2000b). "Have orbitals really been observed?". *Journal of Chemical Education* 77: 1492–1494.
Scerri, E. R. (2001). "The recently claimed observation of atomic orbitals and some related philosophical issues". *Philosophy of Science* 68: S76–S88.
Scerri, E. R. (2004). "Just how ab-initio is ab-initio quantum chemistry?". *Foundations of Chemistry* 6: 93–116.
Scerri, E. R. (2006). "Normative and descriptive philosophy of science and the role of chemistry". En *Philosophy of Chemistry: Synthesis of a New Discipline.* En Baird, D., Scerri, E. y McIntyre, L. (eds.), The Netherlands: Boston Studies in the Philosophy of Science, Springer, pp.119–128.
Scerri, E. R. (2007). *The Periodic Table – Its Story and Its Significance*. New York: Oxford University Press.
Scerri, E. R. y McIntyre, L. (1997). "The Case for the Philosophy of Chemistry". *Synthese* 111: 213–232.
Schwarz, W. H. E. (2006). "Measuring orbitals: Provocation or reality?". *Angewandte Chemie International Edition* 45: 1508–1517.
Simons, J. (1991). "There are no such things as orbitals-act two!". *Journal of Chemical Education* 68: 131–132.
Spence, J. C.; O'Keefe, M. y Zuo, J. M. (2001). "Have orbitals really been observed?". *Journal of Chemical Education* 78: 877.
Tinoco I.; Sauer, K.; Wang, J. C. y Puglisi, J. D. (2002). *Physical Chemistry – Principles and Applications in Biological Sciences.* New Jersey: Prentice Hall.
van Brakel, J. (2000). *Philosophy of Chemistry. Between the Manifest and the Scientific Image*. Leuven: Leuven University Press.
Vancik, H. (1999). "Opus Magnum: An Outline for the Philosophy of Chemistry". *Foundations of Chemistry* 1: 242–256.
Vemulapalli, G. K. y Byerly, H. (1999). "Remnants of Reductionism". *Foundations of Chemistry* 1: 17–41.
Wang, S. G.; Schwarz, W. H. (2000). "On closed-shell interactions, polar covalences, d shell holes, and direct images of orbitals: The case of cuprite". *Angewandte Chemie International Edition* 39: 1757–1762.
Woolley, R. G. (1982). "Natural Optical Activity and the Molecular Hypothesis." *Structure and Bonding* 52: 1–35.
Yam, P. (1999). "Seeing the Bonds". *Scientific American* 281: 28.
Zuo, J. M., Kim, M., O'Keefe, M.; Spence, J. C. H. (1999a). "Direct Observation of d-Orbital Holes and Cu-Cu Bonding in Cu_2O". *Nature* 401: 49–52.
Zurer, P. (1999b). "Chemistry's Top Five Achievements". *Chemical & Engineering News* 77: 38–40.

CAPÍTULO 6

Relaciones entre química y física II: El problema de la estructura molecular

Sebastian Fortin
CONICET – Universidad de Buenos Aires

1. Introducción

El concepto de estructura molecular juega un rol central en los razonamientos y deducciones del pensamiento de un químico. Pensar a las moléculas como un conjunto de átomos con una disposición definida en el espacio y unidos por enlaces químicos tiene un gran poder predictivo y explicativo. También es un concepto muy útil en la educación química para racionalizar y visualizar fenómenos microscópicos. Sin embargo, tal concepto parece no encontrar lugar en la ontología descrita por la mecánica cuántica, ya que apela a nociones clásicas como la posición de los núcleos atómicos o la individualidad de los electrones, ambas ideas fuertemente desafiadas en el contexto cuántico. Aunque este problema ha atraído la atención de varios autores, la discusión está lejos de resolverse: las opiniones sobre el vínculo entre los conceptos cuánticos y la noción de estructura molecular divergen notablemente.

Muchos autores han enfatizado el choque conceptual entre la mecánica cuántica y la química molecular. De hecho, un sistema cuántico es una entidad contextual, descrita por su vector de estado representado en el espacio de Hilbert, que no se puede separar en partes, y que mantiene correlaciones no locales con otros sistemas cuánticos. En química molecular, por el contrario, una molécula es una entidad con propiedades definidas –como su forma–, representada en el espacio de 3 dimensiones y sin correlaciones no locales con otras entidades (*cfr.* Por ejemplo, Amman, 1992; Primas, 1994). Por estos motivos, el caso de la estructura molecular es un ejemplo de la problemática general que refiere a las relaciones intertóricas tan estudiadas por la filosofía general de las ciencias.

Los problemas para reconciliar las contradicciones entre la mecánica cuántica y la química estructural suelen estudiarse desde tres puntos de vista filosóficos. En primer

lugar se encuentra el reduccionismo, que cuenta con un capítulo propio en este libro. Según esta forma de pensar, la mecánica cuántica es una teoría fundamental que explica por si misma todos los fenómenos químicos, es decir, todas las leyes y entidades utilizadas por la química pueden ser deducidas a partir de la mecánica cuántica. Siguiendo este mandato algunos autores adoptan una posición explícitamente reduccionista y abogan por reconstruir el concepto de estructura molecular dentro del marco de la teoría cuántica de los átomos en las moléculas (Hettema, 2012). En segundo lugar es posible recurrir a un esquema de jerarquía de niveles como los que plantean la Emergencia o la Superveniencia. A grandes rasgos, según este tipo de planteos la realidad se organiza en niveles cada uno con sus características ontológicas o epistémica. Cada nivel ofrece una descripción del mundo a partir de la postulación de entidades que siguen leyes propias que no necesariamente pueden deducirse lógicamente del nivel inferior. Sin embargo subsiste la idea de jerarquía, los niveles inferiores son más fundamentales y generalmente vinculados al mundo microscópico y los niveles superiores son menos fundamentales y se los asocia al mundo macroscópico. Desde este tipo de descripción es posible argumentar que la estructura molecular, que pertenece a un nivel superior, 'emerge' a partir de los sistemas cuánticos fundamentales del nivel (Hendry, 2010). Finalmente la tercera opción es adoptar alguna variante de pluralismo ontológico. Según esta propuesta el esquema de la jerarquía de niveles postula una asimetría entre los niveles que en muchos casos es innecesaria. La existencia de niveles superiores e inferiores puede entenderse como una forma de reduccionismo débil que no captura apropiadamente la relación entre distintas teorías que coexisten y ofrecen descripciones del mundo contradictorias. En concreto, el pluralismo propone la coexistencia de diferentes planos de la realidad cada uno con sus propias características ontológicas y epistémicas. De este modo, cada plano ofrece una descripción del mundo que se relaciona con las otras en pie de igualdad y no jerárquicamente. En este caso implica, por un lado, conceder la existencia de un plano cuántico que habitan las partículas cuánticas en el que no existe la estructura, y por otro, reconocer la existencia de un plano químico en el que habitan las moléculas con estructura (Fortin, Labarca y Lombardi, 2022).

En este capítulo, el objetivo es exponer y analizar la contradicción fundamental que implica aceptar la estructura molecular y los axiomas de la mecánica cuántica al mismo tiempo. Por otro lado, se expondrá la forma en que las tres posiciones filosóficas atacan el problema.

2. La mecánica cuántica y el programa reduccionista

Para entender los problemas que surgen a la hora de intentar compatibilizar la mecánica cuántica con la estructura molecular es necesario primero comprender el esquema reduccionista planteado a principios del siglo XX. El surgimiento de la mecánica cuántica vino acompañado con una serie se éxitos que llenaron de optimismo a algunos científicos de la época. Para Paul Dirac, uno de los padres de la mecánica cuántica, la nueva teoría sería capaz de reducir a la química completamente:

> *La teoría general de la mecánica cuántica está ahora casi completa, las imperfecciones todavía permanecen en conexión con la adaptación exacta de la teoría a las ideas relativistas […] las leyes físicas subyacentes necesarias para la teoría matemática de una gran parte de la física y la totalidad de la química son completamente conocidas y la dificultad sólo reside en que la aplicación exacta de esas leyes conduce a ecuaciones demasiado complicadas para ser resolubles. Por lo tanto es deseable que se desarrollen métodos prácticos aproximados de aplicar la mecánica cuántica, los cuales puedan conducir a una explicación de las principales características de sistemas atómicos complejos sin demasiados cálculos* (Dirac, 1929, p.714)

Con estas palabras Dirac fundaba el programa de la química cuántica estableciendo sus objetivos, las dificultades que encontraría para alcanzarlos y los medios para superar esas dificultades. El objetivo de aplicar la mecánica cuántica a la química tiene la dificultad de que las ecuaciones matemáticas son muy complicadas para poder resolverlas. Por ese motivo será necesario introducir algunas aproximaciones para superar este inconveniente. Efectivamente este programa ha sido llevado adelante y continúa desarrollándose hasta la actualidad. Desde el punto de vista práctico ha tenido un éxito impresionante, sobre todo a partir de la introducción de métodos numéricos implementados en computadoras digitales. En la actualidad es posible calcular muchas propiedades de moléculas complejas con estos métodos. No obstante es necesario preguntarse si es correcto extender el éxito de la química cuántica al programa reduccionista. Para poder afirmar que se ha reducido la química a la física es necesario constatar que a partir de la aplicación de la mecánica cuántica pura se ha logrado llegar a calcular todas las propiedades de una sustancia y también explicar todos los procesos químicos a partir de argumentos mecánico cuánticos. En este punto conviene detenerse un momento a revisar cómo funciona la mecánica cuántica.

2.1. El formalismo cuántico

Para aplicar la mecánica cuántica a cualquier sistema el primer paso consiste es escribir el Hamiltoniano $\hat{H}$ del sistema, éste es un objeto matemático que lleva la información sobre las características específicas del sistema a ser tratado. Luego, con el Hamiltoniano es posible escribir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (1)$$

donde ψ es la función de onda. Luego, resolviendo esta ecuación es posible encontrar las autofunciones φ_i del Hamiltoniano que son funciones matemáticas que representan los estados posibles del sistema que tienen energía bien definida. Si se asume que el sistema está en reposo y no ha sido excitado entonces se encontrará en el estado de mínima energía, es decir, en el estado fundamental φ_0. Para una molécula en el estado fundamental su función de onda es φ_0 y encierra todas las propiedades del sistema que puede proveer la mecánica cuántica. Por lo tanto para el reduccionismo debería ser posible poder calcular todas las propiedades de una molécula, incluida su estructura, a partir de una función de onda que ha sido obtenida con este procedimiento.

Desde el punto de vista de la mecánica cuántica una molécula es un conjunto de núcleos con carga positiva y electrones con carga negativa que interactúan mediante un potencial Coulombiano. Una molécula cualquiera tiene un número *A* de núcleos atómicos, cada uno de estos núcleos tiene asociado un operador momento $\hat{p}_g$ y un operador de posición $\hat{r}_g$, donde *g* es un índice que etiqueta a cada núcleo y es un número entero entre 1 y *A*. Además, cada núcleo tiene su masa m_g y un número atómico Z_g. Por otra parte, la molécula tendrá *N* electrones con su correspondiente operador momento $\hat{p}_i$ y su operador posición $\hat{r}_i$. Dado que todas las partículas están cargadas interactúan Coulombianamente todas con todo el resto, la intensidad de esta interacción depende de la carga y distancia entre ellas. El Hamiltoniano para un sistema de este tipo es el siguiente (Fortin, Lombardi y Martínez Gonzalez 2017):

$$\hat{H} = \sum_{g}^{A} \frac{\hat{\vec{p}}_g^2}{2m_g} + e^2 \sum_{g<h}^{A} \frac{Z_g Z_h}{2m_g} \left|\hat{\vec{r}}_g - \hat{\vec{r}}_h\right|^{-1} + \sum_{i}^{N} \left(\frac{\hat{\vec{p}}_i^2}{2m_e} - e^2 \sum_{g}^{A} Z_g \left|\hat{\vec{r}}_g - \hat{\vec{r}}_i\right|^{-1} \right) + e^2 \sum_{i<j}^{N} \left|\hat{\vec{r}}_j - \hat{\vec{r}}_i\right|^{-1} \quad (2)$$

donde e es la carga del electrón y m_e su masa. A partir de este Hamiltoniano, el procedimiento indica que resolviendo la ecuación de Schrödinger sería posible encontrar la función de onda y obtener la estructura molecular. Sin embargo se presentan varios inconvenientes entre los cuales se encuentran

i. El problema de los núcleos fijos: El principio de Heisenberg según el cual una partícula cuántica no puede tener posición y velocidad definidas al mismo tiempo entra en contradicción con la idea de núcleos fijos formando una estructura.

ii. El problema de las 3*N* dimensiones: La función de onda no está definida en el espacio tridimensional sobre el que se define la estructura molecular.

iii. El problema de las simetrías: Las simetrías del Hamiltoniano cuántico de una molécula entran en contradicción con la estructura de algunas moléculas

Los problemas de compatibilidad entre la mecánica cuántica y la estructura molecular han sido tratados extensamente en la filosofía de la ciencias y no se reducen a los tres mencionados. Sin embargo, debido una cuestión de espacio y a que resultan muy ilustrativos, en este capítulo se mostrará el modo en que las distintas perspectivas filosóficas atacan estos tres problemas. Como se ha mencionado, históricamente la posición predominante ha sido el reduccionismo y los tres problemas representan un desafío para su programa. Por lo tanto, desde esta posición la estrategia consta en desarrollar mecanismos que permitan dan una respuesta a las dificultades sin salirse de la mecánica cuántica. Por su parte, desde la jerarquía de niveles y el pluralismo se argumenta que dichos desarrollos vuelven el problema más complejo pero no logran cumplir su objetivo. A continuación se presenta una formulación detallada de los problemas y algunos de estos desarrollos.

3. El problema de los núcleos fijos

Como dijera Dirac, no se dispone de las herramientas de cálculo o el poder computacional suficientes para resolver la ecuación de Schrödinger exactamente y por este motivo al estudiar sistemas químicos a partir de la mecánica cuántica se utilizan aproximaciones. Una de las más utilizadas es la aproximación de núcleos fijos. Esta aproximación surge a partir de considerar que la masa de los núcleos atómicos es mucho mayor que la de los electrones, por lo tanto la velocidad de los núcleos será relativamente pequeña y para

simplificar el cálculo se puede considerar que están quietos. Entonces se le asigna una posición fija a cada núcleo atómico y resulta el siguiente Hamiltoniano para los electrones

$$\hat{H} = \sum_{g}^{A} \frac{\overline{p}_g^2}{2m_g} + e^2 \sum_{g<h}^{A} \frac{Z_g Z_h}{2m_g} \left| \overline{r}_g - \overline{r}_h \right|^{-1} + \sum_{i}^{N} \left(\frac{\hat{\overline{p}}_i^2}{2m_e} - e^2 \sum_{g}^{A} Z_g \left| \overline{r}_g - \hat{\overline{r}}_i \right|^{-1} \right) + e^2 \sum_{i<j}^{N} \left| \hat{\overline{r}}_j - \hat{\overline{r}}_i \right|^{-1} \quad (3)$$

Nótese que ahora $\overline{p}_g$, $\overline{r}_g$ y $\overline{r}_h$ ya no son operadores como en (2), sino vectores ordinarios $\left| \overline{r}_g - \overline{r}_h \right|$ ahora es la distancia entre los núcleos. Los únicos operadores que persisten luego de la aproximación son los de posición y momento de los electrones. En efecto, los dos primeros términos pasan a ser constantes y pueden eliminarse de la expresión porque la energía siempre está definida a menos de una constante y si se define $\hat{V}_i(\hat{\overline{r}}_i) = -e^2 \sum_g^A Z_g \left| \overline{r}_g - \hat{\overline{r}}_i \right|^{-1}$ entonces se obtiene un Hamiltoniano más simple para los electrones

$$\hat{H} = \sum_{i}^{N} \left(\frac{\hat{\overline{p}}_i^2}{2m_e} + \hat{V}_i(\hat{\overline{r}}_i) \right) + e^2 \sum_{i<j}^{N} \left| \hat{\overline{r}}_j - \hat{\overline{r}}_i \right|^{-1} \quad (4)$$

Entonces el problema se transforma completamente: se pasa de un *Hamiltoniano de la molécula* a un *Hamiltoniano de los electrones en la molécula*. Resolver la ecuación (1) con el Hamiltoniano (4) resulta más realista para las computadoras actuales, y las energías calculadas coinciden con las medidas en el laboratorio, por lo que se lo considera un método exitoso.

El procedimiento aquí descripto resulta exitoso en la práctica y nadie cuestiona su uso, pero su interpretación es motivo de debate. En el contexto de la discusión sobre la estructura molecular el paso de interés es el de considerar que los núcleos atómicos están fijos. En este punto es importante recordar que en mecánica cuántica las partículas se encuentran deslocalizadas y el principio de indeterminación de Heisenberg prohíbe que una partícula cuántica tenga la posición y la velocidad bien definidas. Esto muestra que los principios de la mecánica cuántica entran en franca contradicción con el concepto de estructura. Teniendo esto en cuenta, desde las posiciones antireduccionistas se señala que la mecánica cuántica no es capaz de explicar la estructura molecular por sí misma, sino que tiene que apelar a procedimientos ajenos a la teoría que entran en contradicción con sus postulados. De este modo se afirma que no es posible realizar la reducción en forma directa y la relación entre los dos campos debe explicarse desde otro enfoque, la jerarquía de niveles o el pluralismo. O bien, para mantener una postura reduccionista es necesario

introducir algún mecanismo compatible con la mecánica cuántica que ayude a compatibilizarla con el concepto de estructura.

4. El problema de las 3N dimensiones

El problema de las 3N dimensiones, normalmente no se presenta en la práctica científica debido a que como vimos en el apartado anterior nunca se trabaja con el Hamiltoniano real de la molécula, sino con otros aproximados. No obstante, volviendo al Hamiltoniano exacto de la molécula, el problema surge a partir del tratamiento cuántico de sistemas compuestos. En el caso de un sistema que consta de una sola partícula, la función de onda es una función de 3 dimensiones. En este caso es posible identificar esas tres dimensiones con las tres dimensiones espaciales (x, y, z) que todos percibimos. Sin embargo, para un sistema de dos partículas la función de onda está definida en un espacio de 6 dimensiones, tres para una partícula y tres para la otra. Y para un sistema de N partículas la función de onda tiene 3N dimensiones. Este hecho es motivo de debate en la filosofía de la física y es un tema central en las discusiones sobre la interpretación de la mecánica cuántica y la construcción de su ontología. En efecto ha llevado a algunos autores a afirmar que el espacio físico real tiene 3N dimensiones mientras que las 3 dimensiones que percibimos en la vida cotidiana son sólo una ilusión (Albert, 2013).

En el caso de la química el espacio físico que se utiliza para representar la estructura molecular es el espacio físico ordinario de tres dimensiones. Entonces surge la dificultad de relacionar estas 3N dimensiones de la cuántica con las 3 dimensiones de la química. Para poder deducir la estructura molecular a partir de un procedimiento puramente cuántico primero es necesario desarrollar un método para recuperar una estructura 3D a partir de una función de onda 3ND que esté debidamente justificado y no viole ningún principio cuántico.

El Hamiltoniano completo de la ecuación (2) representa a un sistema con un número $A+N$ partículas cuánticas (A núcleos y N electrones) por lo que la función de onda del sistema está definida en un espacio de $3\times(A+N)$ dimensiones. La aproximación de núcleos fijos elimina las $3A$ dimensiones de los núcleos por lo que cuando se utiliza esta aproximación se obtiene un Hamiltoniano como el de la ecuación (4) y la función de onda tiene $3N$ dimensiones. En este punto es importante tener en cuenta que aun librándose de los núcleos atómicos una molécula posee una cantidad

importante de electrones. Una molécula relativamente simple como la del ácido sulfúrico (H_2SO_4) tiene 50 electrones y las ecuaciones de estos 50 cuerpos interactuando pueden ser extremadamente complejas. Por este motivo, a pesar de que el paso del Hamiltoniano (2) al (4) representa una gran simplificación del problema las ecuaciones resultantes aún son muy complicadas como para que se puedan resolver y se aplica una segunda aproximación conocida como la Aproximación del Electrón Independiente (AEI). Este procedimiento está basado en la idea de que reemplazando la interacción entre las partículas por un potencial efectivo, es posible pensar a cada uno de los electrones por separado. Es decir, para un electrón *i* se define un potencial efectivo $\hat{v}_i(\hat{r}_i)$ que emula la influencia del resto de los electrones y se reemplaza el término interacción de la expresión (4) por este potencial efectivo

$$\hat{H} = \sum_{i}^{N} \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + \hat{V}_i(\hat{r}_i) + \hat{v}_i(\hat{r}_i) \right) \qquad (5)$$

De este modo se obtiene un Hamiltoniano total que es la suma de los Hamiltonianos individuales $\hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + \hat{V}_i(\hat{r}_i) + \hat{v}_i(\hat{r}_i)$ de cada electrón y como no hay un término de interacción entre ellos se puede resolver la ecuación de Schrödinger de cada electrón por separado

$$\hat{H}_i \psi_i = E_i \psi_i \qquad (6)$$

De este modo, el problema original en 3*N* dimensiones se transforma en *N* problemas de tres dimensiones. Por lo tanto es posible pensar que cada electrón tiene su propia energía y su propia función de onda de 3 dimensiones, es decir, ocupa un orbital determinado.

Desde el reduccionismo este cálculo se percibe como una forma de recuperar el espacio físico 3D que utiliza la química para definir la estructura. Sin embargo, un análisis detallado revela que los pasos realizados en la Aproximación del Electrón Independiente contradicen los postulados de la mecánica cuántica. En efecto, AEI no es una aproximación en el sentido convencional, sino que se trata de cambiar un sistema por otro. Nuevamente desde las posiciones antireduccionistas se argumenta que el procedimiento por medio del cual se pasa a 3 dimensiones es incompatible con la mecánica cuántica que está formulada en 3*N* dimensiones.

5. El problema de las simetrías

El tercer problema que surge está vinculado a las simetrías del Hamiltoniano, ya que las características matemáticas de la ecuación de Schrödinger hacen que las simetrías del Hamiltoniano se trasladen a la función de onda.

Cuando un cierto objeto no cambia cuando se le aplica una transformación este objeto tiene una simetría. Por ejemplo, una esfera es simétrica ante rotaciones porque el resultado de rotarla es completamente inocuo. Es decir, si se considera un esfera perfecto y se compara su estado con el que resulta después de rotarla, se encontrará que el estado es exactamente el mismo. Desde el punto de vista matemático estas transformaciones pueden representarse por un operador $\mathbf{T}$ que se aplica a otro objeto matemático. Si al aplicar el operador $\mathbf{T}$ a un cierto objeto queda exactamente igual que antes entonces ese objeto matemático tiene una simetría.

Sea un Hamiltoniano $\hat{H}$ con sus autofunciones φ_n, de modo que $\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$, y una transformación de $\mathbf{T}$ que deja invariante al Hamiltoniano, es decir $\mathbf{T}\hat{H} = \hat{H}$. Entonces es posible demostrar que las autofunciones también tienen esa simetría, es decir

$$\text{Si } \mathbf{T}\hat{H} = \hat{H} \text{ entonces } \mathbf{T}\varphi_n = \varphi_n \tag{7}$$

Esto es importante para el problema de la estructura molecular por lo siguiente. El Hamiltoniano de a una molécula genérica de la ecuación (2) corresponde a partículas interactuando a partir del potencial de Coulomb. Pero la fuerza eléctrica sólo depende de las distancias entonces el Hamiltoniano de un sistema X va a ser el mismo que el de otro sistema X’ que tenga las mismas partículas respetando las mismas distancias entre ellas. Esto significa que el Hamiltoniano de una molécula es igual al Hamiltoniano de una molécula que es la imagen especular de la primera tanto en su versión exacta (2) como en su versión de núcleos fijos (4). Por lo tanto, para la mecánica cuántica un par de enantiómeros van a tener el mismo Hamiltoniano y por lo tanto las mismas autofunciones, los mismos orbitales y las mismas propiedades químicas. Sin embargo, en química es bien conocido que los enantiómeros o isómeros ópticos tienen propiedades químicas muy diferentes. Son moléculas distintas. De este modo, si para la mecánica cuántica un miembro del par es exactamente igual al otro, tiene problemas para explicar la estructura de estas moléculas.

En el caso de los enantiómeros es posible plantear un esquema similar al del problema de la medición en mecánica cuántica. Dado que el Hamiltoniano tiene simetría

ante reflexiones no distingue entre las moléculas *R* y *S*, entonces el estado fundamental de este sistema debe ser simétrico. La única opción para obtener un estado simétrico a partir de las funciones de onda ψ_R y ψ_S que corresponden a cada una de las estructuras *R* y *S*, es plantear una superposición. El estado más simple que puede obtenerse a partir de estas restricciones es

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_R + \psi_S\right) \tag{8}$$

Si este es el estado de la molécula entonces el problema de los isómeros ópticos se puede replantear de siguiente modo: Si el estado del sistema es ψ ¿Por qué al realizar una medición siempre se detecta a la molécula en los estados ψ_R y ψ_S pero nunca en el estado ψ ? Es decir, ¿cómo se pasa de una superposición a un estado bien definido en una medición? que es, efectivamente, la pregunta central del problema de la medición en física cuántica.

Desde el reduccionismo se argumenta que como el problema de los isómeros ópticos es una expresión del problema de la medición, entonces no debe contarse como un problema que surge a la hora de intentar la reducción de la química a la física. Por el contrario, autores como Vanessa Seifert y Alexander Franklin (Franklin y Seifert, 2020) reconocen al problema como interno de la física y afirman que si se logra resolver el problema de la medición en física entonces automáticamente queda resuelto el problema de la estructura. Desde la perspectiva antireduccionista, sin embargo, la resolución del problema de la medición no implica resolver el problema de la estructura. En primer lugar porque el problema de la estructura es mucho más amplio que el problema de los isómeros ópticos, y en segundo lugar porque una solución al problema de la medición sólo lograría explicar por qué medimos lo que medimos en nuestros aparatos de medición pero no dice nada sobre las propiedades del sistema. La estructura de estas moléculas no sólo se manifiesta a la hora de medir su quiralidad haciendo pasar un haz de luz polarizada por una solución de esta sustancia, sino que tiene manifestaciones en el tipo de reacciones químicas en las que puede participar. Por lo tanto, explicar una medición directa de la quiralidad no resuelve el problema (Fortin y Lombardi, 2021).

Por otro lado, este problema se puede extender a todos los isómeros porque además de la simetría de reflexión, hay otras simetrías del Hamiltoniano que hace que todos los isómeros de una sustancia tengan el mismo Hamiltoniano. La expresión (2) da

cuenta de la cantidad de electrones y núcleos atómicos en una molécula pero no hay ningún parámetro que indique cual es la posición de los núcleos porque como ya se ha señalado, las partículas cuánticas no tienen posición bien definida. Por lo tanto, por poner un ejemplo, tanto el etanol y el éter dimetílico tienen la misma fórmula molecular C_2H_6O y el mismo Hamiltoniano exacto. La diferencia con los isómeros ópticos es que en este caso el etanol y el éter dimetílico no tienen el mismo Hamiltoniano de núcleos fijos justamente porque en (4) la estructura que los distingue ha sido introducida de forma ad hoc desde fuera de la mecánica cuántica. Esto significa que para la mecánica cuántica estas dos sustancias son la misma y la forma de explicar sus diferencias requiere descartar el Hamiltoniano cuántico y la introducción de información que no proviene de cálculos de primeros principios.

Finalmente, la otra simetría que presenta un inconveniente es la simetría ante rotaciones del Hamiltoniano. Es posible demostrar que el Hamiltoniano tiene simetría esférica y por lo tanto las autofunciones también van a tener simetría esférica. Esta simetría es incompatible con la noción de estructura molecular ya que la estructura de cualquier molécula rompe con esta simetría.

6. Reduccionismo, emergentismo y pluralismo

Como ya se ha adelantado, los problemas señalados en las secciones anteriores pueden ser interpretados desde distintas posiciones filosóficas, pero por cuestiones históricas el debate se desarrolla en torno al reduccionismo. Por ejemplo, el hecho de que las últimas tres secciones tengan títulos como 'El problema de…' revela su centralidad en el planteo ya que las cuestiones señaladas en esas secciones son un problema para el reduccionismo pero no para la jerarquía de niveles o para el pluralismo. Esta centralidad se explica a partir de las razones vinculadas a su tradición y el tipo de argumentos utilizados para defender esa posición.

6.1. El punto de vista reduccionista

La idea de reducción tiene una larga tradición tanto en la historia de la filosofía como en la historia de la ciencia. Ya en la filosofía presocrática de Mileto existía la idea de reducir la multiplicidad a la unidad a partir de la postulación de una materia fundamental con la que todo está hecho. Aunque este monismo inicial fue reemplazado más tarde por una imagen óntica basada en varios principios materiales, el intento de reducir la realidad

empírica diversificada a un reino subyacente más simple ha sido fructífera y sobrevive hasta hoy. Los grandes proyectos de la física del siglo XIX fueron concebidos en términos reduccionistas y dieron lugar a teorías muy exitosas. La mecánica estadística, bajo el supuesto de que los gases no son más que partículas en interacción mecánica y el electromagnetismo, en el Maxwell unifica una gran cantidad de fenómenos e intenta reducirlos a vibraciones mecánicas de un éter luminífero. En ambos casos, la suposición ontológica subyacente era que la naturaleza está hecha de entidades mecánicas gobernadas por la física newtoniana. Con el surgimiento de la mecánica cuántica, en cuyo desarrollo la descripción del átomo de hidrógeno fue un tema central, el paso natural fue continuar con la concepción reduccionista tomando ahora como teoría fundamental a la mecánica cuántica. Es este contexto y estimulado por el optimismo que siguió al éxito de la teoría es que Paul Dirac afirma que es posible explicar 'toda la química' en términos cuánticos. Una vez admitido el supuesto de reducción, éste afecta directamente al concepto de estructura molecular, ya que no es una noción auxiliar o secundaria, sino un concepto central de la química. La estructura molecular es

> *"el dogma central de la ciencia molecular"* (Woolley, 1978, p.1074)

y

> *"es tan fundamental para la explicación química que explicar la estructura molecular es más o menos explicar toda la química"* (Hendry, 2010, p.183)

Un representante de una postura explícitamente reduccionista es Hinne Hettema (2012), quien considera que la química molecular puede reducirse a la mecánica cuántica cuando se ajusta adecuadamente la definición tradicional de reducción. Según él, el hecho de no reconocer la reducción se debe, al menos en parte, al escaso impacto de los recientes desarrollos de la química cuántica en la filosofía de la química actual. Sin embargo, cuando se analizan en detalle las relaciones entre la química molecular y la mecánica cuántica, Hettema admite que los vínculos no proporcionan una reducción global sino sólo reducciones locales y parciales de teorías químicas particulares. Se introducen idealizaciones y aproximaciones que establecen conexiones vagas y discontinuas entre las teorías e incluso se extraen conceptos fuera de contexto para utilizarlos y de una manera inadmisible para la teoría a la que pertenecen originalmente. En resumen, esos vínculos proporcionan una noción débil de reducción, tan débil que es posible preguntarse por qué la relación todavía se llama 'reducción' en lugar de 'vínculo interteórico'.

Otra estrategia reduccionista se basa en los avances teóricos sobre el proceso de medición cuántica, en particular la decoherencia cuántica concebida como el proceso que explica el límite clásico de la mecánica cuántica. La decoherencia inducida por el entorno proporcionaría la conexión necesaria entre los conceptos clásicos de química molecular y el dominio cuántico (Trost y Hornberger, 2009). Por ejemplo, al discutir el problema de la isomería óptica, Eric Scerri señala que "este problema ha comenzado a disolverse gradualmente con la creciente comprensión del papel de la decoherencia cuántica en la física y otras disciplinas" (Scerri, 2011 y 2013). Sin embargo, en el dominio de la filosofía de la física, prevalece un profundo escepticismo sobre eficacia de la decoherencia para dar cuenta del límite clásico. Aunque afirmaciones ingenuas del tipo de que la decoherencia da una respuesta completa al problema de la medición todavía forman parte del 'folclore', no da solución ni al problema de la medición ni, en general, al problema del límite clásico (Bacciagaluppi, 2012).

En la actualidad, la estrategia reduccionista más fuerte con respecto a la estructura molecular está basada en la Teoría Cuántica de Átomos en Moléculas (TCAM), propuesta por Richar Bader en la década de los noventa (Bader, 1991). Según esta teoría, la estructura molecular se puede obtener a partir de las propiedades topológicas de la densidad de electrones del sistema, que se define en el espacio físico tridimensional. En particular, las posiciones de los núcleos atómicos se identifican con máximos relativos de la densidad electrónica recuperando así la estructura. La imagen visualmente atractiva de una molécula que ofrece TCAM lleva a algunos filósofos de la química como Hinne Hettema (2012) a afirmar que con esta teoría se resuelve el problema de la estructura molecular. Sin embargo, el optimismo debería estar moderado debido a que en la práctica TCAM se aplica a una densidad electrónica que se obtiene a través de la aproximación de núcleos fijos, por lo tanto subsiste el hecho de que no es posible calcular la estructura desde primeros principios y por otro lado no resuelve el problema delas simetrías.

En otros casos, aun admitiendo la imposibilidad de derivar la estructura molecular de la mecánica cuántica, algunos autores con espíritu reduccionista consideran que esta imposibilidad no es el resultado de un obstáculo conceptual. Por el contrario, sería consecuencia de nuestro conocimiento parcial de los sistemas moleculares en el marco teórico de la mecánica cuántica, limitación que se irá superando paulatinamente en el futuro. Ésta es la posición de Guy Woolley y Brian Sutcliffe, cuando dicen:

Nunca hemos afirmado que la estructura molecular no pueda reconciliarse con la mecánica cuántica o reducirse a ella, o que haya algo extraño en ella; nuestro reclamo es mucho más modesto. No sabemos cómo hacer la conexión (Sutcliffe y Woolley, 2011, p.94).

6.2. El punto de vista de la jerarquía de niveles

Para el reduccionismo llevado a la práctica no es posible intentar la reducción de cualquier fenómeno o entidad directamente desde la teoría fundamental sino que es necesaria una serie de pasos en los que se realizan reducciones sucesivas. Así, la química nos dice que un trozo de madera es 'en realidad' una disposición complicada de muchos tipos de moléculas unidas, la física atómica nos dice que las moléculas son 'en realidad' varios átomos unidos por fuerzas interatómicas, la teoría de las partículas nos dice que los átomos son 'en realidad' partículas elementales en interacción, y así sucesivamente (Rohrlich, 1988). De este modo es posible hablar de niveles, cada uno más fundamental que el anterior y la reducción en cada paso es total, entonces el único nivel 'real' sería el fundamental ya que todo el resto puede ser explicado a partir de este. Ante las dificultades que surgen a la hora de reducir un nivel a otro es posible relajar el requerimiento de reducción 'total' entre niveles. Así, en cada nivel se da dar lugar a ciertos grados de libertad, comportamientos o entidades que no pueden explicarse a partir del nivel inferior. De este modo se dota a cada nivel de novedad e imprevisibilidad respecto del nivel inferior y gana cierto tipo de 'realidad' aunque se mantenga la relación asimétrica en entre ellos. En términos de Philip Anderson, el todo no es simplemente mayor que, sino esencialmente diferente de la suma de las partes (Anderson, 1972). Pero tan pronto como se intenta hacer más precisa la idea general, surgen múltiples puntos de vista, que varían de un autor a otro. Hay muchas maneras de definir estas relaciones y las diferentes formas de hacerlo dan lugar a diferentes versiones de esta idea general, por ejemplo, distintos tipos de emergencia, distintos tipos de superveniencia, etc.

En el caso de la estructura molecular suele apelarse a la emergencia, no obstante, según Jaegwon Kim:

"El término 'emergencia' parece tener un atractivo especial para muchas personas; tiene un tono expansivo y edificante, a diferencia de la 'reducción', que suena constrictiva y dominante. Ahora vemos que el término se difunde libremente, especialmente por algunos científicos y escritores científicos, con

poca consideración visible de si su uso está respaldado por un significado coherente, tolerablemente unificado y compartido" (Kim, 2006, p.547)

En efecto, hay una emergencia sincrónica y otra diacrónica, la epistémica y la ontológica, la reductiva y la no reductiva. En el caso de la estructura molecular la versión más adecuada parece la emergencia ontológica sincrónica no reductiva. Por otro lado hay desacuerdos sobre qué categorías ontológicas –objetos, propiedades, procesos, etc.- pueden ser emergentes; a veces la emergencia se identifica con otras nociones, como la superveniencia, no hay consenso sobre si la causalidad descendente es un requisito para la emergencia o no; etc. Por ese motivo defender o atacar una posición emergentista puede llegar a convertirse en un laberinto y aquí se intentará abordar el tema desde una perspectiva general.

La emergencia es una relación esencialmente asimétrica: si A emerge de B, entonces B no emerge de A. La mayoría de los emergentistas basan esta asimetría en el fisicalismo, es decir, la creencia de que no hay elementos existentes más allá de los elementos físicos, y que todas las regularidades reales dependen de las regularidades fundamentales del dominio básico de la física. Esta suposición otorga al nivel físico una prioridad ontológica sobre los niveles restantes de la realidad, y esto naturalmente apoya la prioridad teórica de la física sobre otras ciencias especiales. Sin embargo, los emergentistas fisicalistas enfrentan un problema conceptual: su punto de vista parece contradecir el principio metafísico de que algo no puede surgir de la nada (O'Connor, 1994). De hecho, si todos los elementos que pertenecen a los niveles no basales se realizan mediante elementos físicos, ¿cómo puede surgir una novedad genuina? Dicho de otro modo, si las entidades químicas no se componen de nada más que de material físico, ¿cómo se puede justificar la creencia de que existen cosas tales como propiedades químicas que contradigan la mecánica cuántica? Alexandru Manafu (2011) se pregunta,

"Dada la generalidad de la física, ¿cómo se puede preservar sustancialmente la autonomía de la química, es decir, cómo se puede considerar que la química es autónoma de una manera que va más allá de la autonomía histórica o metodológica? Si el fisicalismo es cierto, ¿podemos siquiera hablar de la autonomía ontológica de la química, en contraposición a una autonomía meramente histórica o metodológica?" (Manafu, 2011, p.10).

La asimetría esencial entre los niveles implica una dependencia óntológica: si B surge de A, B depende ónticamente de A, o, en otras palabras, A tiene prioridad óntica sobre B.

Esta dependencia generalmente se expresa en términos contrafácticos, como 'si A no existiera, entonces B tampoco existiría'. Como no hay forma de decidir el valor de verdad de una proposición contrafactual más allá de toda duda, la decisión de priorizar la ontología de alguno de los niveles se apoya en las razones científicas para aceptar la existencia de los ítems –objetos, propiedades, procesos– descritos por las mejores teorías. Sin embargo es posible evaluar la contraparte epistémica del contrafactico ontológico, ¿perderíamos el conocimiento químico sobre las moléculas si no contáramos con los recursos que aporta la mecánica cuántica? La respuesta a esta pregunta ya no pertenece al campo ontológico, sino que se refiere a lo que efectivamente sucede en la ciencia. Autores como van Brakel (2000) afirman que si la química molecular resultara estar equivocada, no descalificaría todo (o incluso cualquier) conocimiento sobre, digamos, el agua. Esto significa que la relación de dependencia entre teorías no ofrece buenos argumentos conceptuales para sustentar la dependencia ontológica de la estructura molecular en el dominio cuántico.

6.3. El punto de vista del pluralismo ontológico

Resumiendo los puntos anteriores podría afirmarse que los problemas a la hora de aplicar la idea tradicional de reducción de la química a la física llevó a la adopción de la emergencia como una perspectiva no reduccionista que superaría las dificultades de la visión reduccionista. Sin embargo, el emergentismo incorpora supuestos metafísicos sobre la dependencia ontológica del dominio molecular del reino cuántico que, lejos de estar científicamente sustentados, parecen reeditar la jerarquía tradicional de las ciencias sustentada por el positivismo. Siendo que los supuestos del reduccionismo y del emergentismo aplicados a este caso manifiestan limitaciones importantes, vale la pena considerar una tercera posición filosófica: el pluralismo ontológico.

Un camino para ilustrar los principios del pluralismo ontológico es el que se basa en la filosofía trascendental. Según Kant, existe una realidad que es independiente del sujeto cognoscente: pero es un reino nouménico, que no es objeto de nuestro conocimiento. No tiene sentido especular sobre un dominio ontológico independiente, ya que no existen elementos ónticos como objetos, propiedades o procesos en la realidad nouménica: el noúmeno es inefable, sólo puede concebirse como un límite del pensamiento. El mundo, habitado por los objetos de conocimiento, resulta de la síntesis entre las categorías del entendimiento y el material proveniente de la experiencia. Por

tanto, el mundo al que se refiere nuestro conocimiento científico no es una mera ontología 'epistemologizada' resultante de nuestros medios contingentes de acceso a la realidad. El sistema kantiano no es una epistemología sino un marco filosófico amplio que establece las condiciones necesarias de posibilidad de conocimiento y, por tanto, de cualquier discurso científico significativo. En el campo de la filosofía de la química, Olimpia Lombardi y Martín Labarca (2005 y 2006) han adoptado un pluralismo ontológico de raíz explícitamente kantiana para defender la autonomía ontológica del mundo químico con respecto al mundo de la física. Según esta propuesta, una vez establecido que diferentes teorías son aceptadas por la comunidad científica de un mismo tiempo histórico debido a su éxito pragmático, resulta claro que diferentes reinos ontológicos pueden coexistir en la medida en que cada uno de ellos está constituido por su esquema conceptual correspondiente. Pero como no existe el punto de vista privilegiado del 'ojo de Dios', no existe un sólo 'mundo verdadero' al que deban referirse todas las descripciones. Todos los dominios ontológicos provenientes de la ciencia exitosa tienen el mismo estatuto, ya que todos ellos están constituidos por descripciones igualmente objetivas. Es desde este punto de vista que las múltiples y diferentes prácticas científicas se vuelven inteligibles.

Cuando las discusiones desarrolladas en las secciones anteriores se reconsideran a la luz del pluralismo óntico, queda claro que este marco filosófico también se puede aplicar directamente al problema de la estructura molecular. Además, los argumentos en contra de la reducción y la emergencia en este contexto se convierten en argumentos a favor del pluralismo ontológico. Como se ha mostrado, no es posible explicar la estructura de las moléculas en términos de mecánica cuántica a través de vínculos reductores directos, por este motivo no es posible acabar un buen argumento a favor de la reducción ontológica. Entonces, no es posible privar al concepto de estructura molecular de su propia referencia.

El desarrollo exitoso, fundado en sus propios conceptos y métodos, es lo que sustenta la independencia de la química molecular con respecto a la mecánica cuántica desde el punto de vista pragmático y, a la vez, es lo que socava el supuesto de una dependencia ontológica de la estructura molecular. Esto no significa ignorar el uso de los poderosos recursos cuánticos en el contexto de la química molecular, pero sí implica identificarlos precisamente como meros recursos auxiliares, herramientas siempre subordinadas al marco conceptual específicamente químico. Por lo tanto, una vez que se acepta que no hay argumentos suficientes para apoyar la dependencia ontológica, la idea

de que la estructura molecular es una propiedad emergente que surge de entidades cuánticas subyacentes pierde su componente esencial.

El pluralismo ontológico (Lombardi y Pérez Ransanz, 2012) es un marco filosófico particularmente fructífero cuando el problema es interpretar las relaciones entre ontologías descritas por teorías científicas que son exitosas desde un punto de vista empírico. Se opone a la asimetría que presupone el reduccionismo e incorpora implícitamente el emergentismo. Como no hay una perspectiva externa desde la cual se pueda describir la realidad en sí misma, no se puede adoptar un punto de vista neutral para decir que uno de los dominios tiene prioridad ontológica sobre el otro. De este modo el dominio supuestamente reducido o emergente resulta estar tan constituido como el dominio supuestamente basal. En consecuencia, la prioridad óntica del mundo físico resulta ser un mero prejuicio metafísico: conceptos como enlace, forma molecular y orbital se refieren a entidades pertenecientes al dominio ontológico de la química molecular, que sólo depende de su propio cuerpo de conocimiento. Las entidades químicas no deben su existencia a un nivel de realidad ontológicamente más fundamental, sino al hecho de que están descritas por teorías cuyo inmenso poder predictivo y creativo no puede ser ignorado.

Referencias bibliográficas

Albert, D. (2013). Wave function realism. En: Ney, A. y Albert, D. (eds.). *The Wave Function*. New York: Oxford University Press, pp.52-57.

Amann, A. (1992). "Must a molecule have a shape?". *South African Journal of Chemistry* 45: 29-38.

Anderson, P. W. (1972). "More is different". *Science* 177: 393-396.

Bacciagaluppi, G. (2012). The role of decoherence in quantum mechanics. En Zalta, E. N. (ed.). *The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Winter 2012 Edition)*, URL=http://plato.stanford.edu/archives/ win2012/entries/qm-decoherence/

Bader, R. (1991). "A quantum theory of molecular structure and its applications". *Chemical Reviews* 91: 893-928.

Dirac, P. A. M. (1929). "Quantum mechanics of many-electron systems". *Proceedings of the Royal Society A* 338: 714-733.

Fortin, S.; Labarca, M. y Lombardi, O. (2022). "On the ontological status of molecular structure: Is it possible to reconcile molecular chemistry with quantum mechanics?", *Foundations of Science*, https://doi.org/10.1007/s10699-022-09834-4.

Fortin, S. y Lombardi, O. (2021). "Is the problem of molecular structure just the quantum measurement problem?". *Foundations of Chemistry* 23: 379-395.

Fortin, S.; Lombardi, O. y J. C. Martínez González (2017). "The relationship between chemistry and physics from the perspective of Bohmian mechanics". *Foundations of Chemistry* 19: 43-59.

Franklin, A. y Seifert, V. A. (2020). "The Problem of Molecular Structure Just Is The Measurement Problem?", [Preprint], URL: http://philsci-archive.pitt.edu/18380/

Hendry, R. F. (2010). "Ontological reduction and molecular structure". *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 41: 183-191.

Hettema, H. (2012). *Reducing Chemistry to Physics: Limits, Models, Consequences*. Groningen: University of Groningen.

Labarca, M. y Lombardi, O. (2010). "Why orbitals do not exist?". *Foundations of Chemistry* 12: 149-157.

Lombardi, O. y Labarca, M. (2005). "The ontological autonomy of the chemical world". *Foundations of Chemistry* 2: 125-148.

Lombardi, O. y Pérez Ransanz, A. R. (2012). *Los múltiples mundos de la ciencia. Un realismo pluralista y su aplicación a la filosofía de la física*. México D.F.: Siglo XXI.

Fernández González, A. (2010). *La inteligencia emocional como variable predictora de adaptación psicosocial en estudiantes de la Comunidad de Madrid* (Tesis doctoral). Universidad Autónoma de Madrid.

Manafu, A. (2011). *Emergence and Reduction in Science. A Case Study* (Tesis doctoral). School of Graduate and Postdoctoral Studies, University of Western Ontario.

O'Connor, T. (1994). "Emergent properties". *American Philosophical Quarterly* 31: 91-104.

Primas, H. (1994). Hierarchic quantum descriptions and their associated ontologies. En: Laurikainen, K. V., Montonen, C y Sunnarborg, K. (eds.). *Symposium on the Foundations of Modern Physics 1994*. Gif-sur-Yvette: Edition Frontieres, pp.210-220.

Rohrlich, F. (1988). "Pluralistic ontology and theory reduction in the physical sciences". *The British Journal for the Philosophy of Science* 39: 295-312.

Scerri, E. R. (2011). "Editorial 37." *Foundations of Chemistry* 13: 1-7.

Scerri, E. R. (2013). Philosophy of chemistry: where has it been and where is it going. En: Llored, J.-P. (ed.). *The Philosophy of Chemistry: Practices, Methodologies, and Concepts*. Newcastle: Cambridge Scholars Publishing.

Trost, J. y Hornberger, K. (2009). "Hund's paradox and the collisional stabilization of chiral molecules". *Physical Review Letters* 103: 023202.

van Brakel, J. (2000). The nature of chemical substances. En: Bhushan, N. y Rosenfeld, S. (eds.). *Of Minds and* Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry. New York: Oxford University Press.

CAPÍTULO 7

Clases naturales en química: esencialismo y antiesencialismo microestructural

M. Ferreira Ruiz
Departamento de Filosofía, Universität Bielefeld

1. Una aproximación intuitiva al problema de las clases naturales

Una buena forma de introducir la idea de clase natural es precisando qué se entiende por *clase* y qué se entiende por *natural*. En general, la idea de clase apunta a alguna forma de semejanza o característica en común, algo compartido por sus miembros. Es esta semejanza lo que determina su pertenencia a una misma clase. Los agrupamientos en base a una característica en común se pueden llevar a cabo de incontables maneras, lo que nos conduce a la idea de *natural*.

Para precisar esta idea, hay que distinguir entre *objetos* naturales y *agrupamientos* (o *clasificaciones*) naturales. Cuando hablamos de clases naturales, no nos referimos a que la clase en cuestión esté compuesta por objetos naturales, donde por esto entendemos objetos no artificiales, no creados por nosotros, e independientes de la mente humana. La oposición relevante aquí no es entre *objeto natural* y *artefacto*, porque la naturalidad no se predica *de los miembros* de la clase putativa. Por el contrario, la naturalidad se predica del *agrupamiento* o clasificación mismo, independientemente de la naturaleza de sus miembros y cómo hayan venido a la existencia. Esta precisión es particularmente importante en el contexto de una disciplina en buena parte sintética como la química, ya que la creación de 'nuevas' entidades (e.g. elementos sintetizados en laboratorio) puede generar confusiones respecto de la idea de clase natural. En efecto, solemos juzgar que no todas las formas de agrupar objetos son iguales (no funcionan de la misma manera, o no son igualmente legítimas, etc.). Un mejor concepto para capturar el contraste relevante en esta discusión es el de *arbitrariedad*.

Tomemos el conjunto de los objetos dentro de mi mochila, donde podemos encontrar una variedad de cosas: un abrigo, una navaja suiza, líquido para limpiar lentes, un libro, y una billetera. ¿Qué determina la pertenencia de la navaja suiza a la clase? Y

alternativamente, ¿qué determina que mi cepillo de dientes *no* pertenezca a la clase? Parece que lo único que estos ítems tienen en común, y que determina las relaciones de pertenencia y no pertenencia es el hecho contingente, accidental, de encontrarse en este momento dentro de la mochila. Cuando la clasificación de objetos bajo una clase está basada en relaciones de este tipo, parece más bien arbitraria: bien podría agruparlos de muchas otras maneras, no parece haber nada en aquellos objetos mismos que motive agruparlos juntos.

En general, se asume que agrupar determinados elementos *a*, *b*, *c*, bajo la clase *K* es natural si esto nos permite usar la clase putativa de ciertas maneras. Tradicionalmente, los filósofos han asociado las clases naturales con poder explicativo y/o predictivo. La idea es que cuando un agrupamiento es arbitrario, no puedo predecir nada respecto de los objetos, ni puedo explicar nada acerca de ellos. En el ejemplo de la mochila, no puedo predecir qué características tendrá un objeto si saco alguno al azar: puede tener la función de cortar (navaja), ser suave (abrigo), ser azul (libro). Si acaso dos objetos fuesen azules (supongamos, el libro y la billetera), tampoco puedo explicar por qué estos dos objetos se asemejan en lo que respecta a su color. Estas limitaciones son sintomáticas de que una clase no es natural. Las clases naturales *"dividen la naturaleza por sus articulaciones"* (Platón, *Fedro,* 265e).

Pero, ¿cómo sabemos que una clase es natural? ¿Cómo sabemos si nuestros sistemas de clasificaciones dividen la naturaleza por las articulaciones? La tradición filosófica ha identificado algunas características como sintomáticas de que ciertos conceptos de clase corresponden, en efecto, a clases naturales. En la siguiente sección, veremos el rol epistémico que usualmente se asume para las genuinas clases naturales.

2. El rol epistémico de las clases naturales: leyes e inducción

Uno de los puntos de acuerdo más extendidos entre filósofos es que las clases naturales parecen desempeñar un papel epistémico distintivo y crucial: los términos de clase figuran en las inducciones, leyes, generalizaciones, explicaciones científicas. Clasificar ítems en clases naturales genuinas permite llevar a cabo inferencias acerca de sus miembros que no parecen ser posibles para las clasificaciones no naturales. A menudo, esto se expresa en los términos de que las genuinas clases naturales soportan inducciones.

Consideremos un ejemplo recurrente en la literatura: la clase 'cobre', compuesta por todos los objetos de cobre. Una llave, una estatua, una moneda, y todas las instancias de cobre presentan ciertas características en común: un determinado color, una cierta dureza, conducción de la electricidad, etc. Clasificar objetos como pertenecientes a la clase natural cobre parece particularmente útil, porque permite realizar ciertas inferencias. Sé que cualquier instancia de cobre con la que me encuentre en el futuro tendrá determinado color y que conducirá la electricidad. Más aun, podemos formular leyes o generalizaciones del tipo 'El cobre es conductor de electricidad' (por supuesto, hay aquí asociada una visión de que las leyes científicas son universales, no contienen excepciones, y refieren a clases y no a individuos, y son necesarias[4]). Hay algo en esta clasificación que permite estos usos, de lo que las visiones filosóficas intentan dar cuenta o elucidar.

Este presunto rol epistémico de las clases es central al 'nuevo problema de la inducción', esto es, el problema relativo a cómo la evidencia confirma nuestras generalizaciones inductivas. En su respuesta al problema, N. Goodman (1955) introdujo el término *proyectabilidad* para referir al potencial de las clases naturales para la inducción y explicación científicas.

Supongamos que todas las esmeraldas con las que nos encontramos en el pasado, antes de cierto tiempo *t*, son verdes. Parece que en *t* nuestra evidencia confirma la hipótesis

G1 Todas las esmeraldas son verdes

Pero Goodman propone considerar otro predicado, *verdul*, que se aplica a todas aquellas cosas examinadas *antes de* t *y verdes*, o *después de* t *y azules*. Dado como se define el predicado verdul, debemos decir que cada esmeralda observada en el pasado (antes de *t*) es verdul. Así, estos enunciados de evidencia confirman una hipótesis diferente:

G2 Todas las esmeraldas son verdules

en la misma medida en que los enunciados de evidencia con el predicado *verde* confirman G1. El problema viene a la hora de formular predicciones acerca de las esmeraldas para un tiempo posterior a *t*. En efecto, dos predicciones incompatibles resultan igualmente confirmadas por la evidencia pasada:

[4] Para mayores detalles, véase el Capítulo 9.

P1 La próxima esmeralda observada después de t será verde

P2 La próxima esmeralda observada después de t será verdul

(recuérdese que P2 significa que la esmeralda será azul).

La intuición es que P2 debería ser descartado, ¿en qué descansa esta intuición? ¿Qué justifica que aceptemos P1 como legaliforme, y descartemos P2? Por supuesto, verdul es un predicado inventado con el propósito de señalar el problema de que no todos los predicados son iguales, y que la elección de predicados a la hora de hacer inducciones importa mucho. Algunos sirven para formular generalizaciones inductivas y otros no.

La respuesta de Goodman a este problema consiste más bien en una explicación de nuestra elección de predicados para la inducción. Los predicados del tipo 'verde' son preferidos por sobre los predicados del tipo 'verdul' porque los primeros están mucho mejor 'atrincherados' en nuestro lenguaje que los segundos. Un predicado está más atrincherado en el uso de un lenguaje cuanto más ha sido usado exitosamente en el pasado con fines inductivos. En el pasado, proyectamos muchas más hipótesis conteniendo el predicado 'verde' que hipótesis conteniendo el predicado 'verdul'. La sugerencia de Goodman es que cuando dos hipótesis están igualmente apoyadas por la evidencia empírica, como sucede con P1 y P2, entonces aquella que contenga los predicados más atrincherados ha de ser privilegiada por sobre las demás. En base a este atrincheramiento de los predicados, las hipótesis son proyectables (P1) o no proyectables (P2).

En respuesta a Goodman, W. O. Quine (1969) argumentó que lo que hace proyectables las hipótesis del tipo P1 es que refieren a clases naturales. En nuestro ejemplo, la sugerencia es que los objetos verdes conforman una clase natural, mientras que los objetos verdules no. Para Quine, las clases naturales son conjuntos cuyos miembros tienen propiedades semejantes, pero reconoce dificultades para precisar la noción relevante de semejanza. Más importante aún, la pregunta es si nuestros criterios de semejanza recogen divisiones o agrupamientos en la naturaleza, para lo que Quine no tiene una respuesta muy fuerte (sugiere que hemos evolucionado cierta capacidad de reconocer semejanzas que se corresponde con algo en la naturaleza). Una visión realista más fuerte sostendría que los predicados adecuados para las generalizaciones inductivas son aquellos que reflejan o corresponden con agrupamientos reales, independientes de la mente y de nuestros intereses.

En todo caso, si las clases naturales están involucradas en asuntos científicos como inducciones, explicaciones, leyes, etc., entonces son las distintas ciencias especiales las que revelan genuinas clases naturales. Aunque las prácticas clasificatorias son también constitutivas de la experiencia cotidiana (el lenguaje cotidiano está plagado de términos de clase), se asume que las mejores clasificaciones son las que ofrecen las ciencias.

3. Realismo y convencionalismo respecto de las clases naturales

En la sección anterior, vimos las características distintivas de las clases naturales desde un punto de vista epistémico, pero este es uno de los aspectos de la discusión. De hecho, constatar que un predicado está muy atrincherado, e incluso aceptar que esto se debe a que refiere a una clase natural, aun no dice mucho respecto de la naturaleza de las clases naturales. En este capítulo, vamos a ver una postura clásica en filosofía que denominaremos 'microesencialismo', o 'esencialismo microestructural' y que descansa en compromisos metafísicos fuertes respecto de las clases naturales. Pero primero, hay que introducir las actitudes más generales (y opuestas) que se puede tener respecto de las clases naturales: *realismo* y *convencionalismo*.

3.1. Convencionalismo

El convencionalismo es la visión de que no hay tal cosa como genuinas divisiones en la naturaleza. Por el contrario, sostiene que toda supuesta clasificación en clases naturales no es sino un reflejo de los intereses de la investigación. Los científicos encuentran útil para sus propósitos agrupar los objetos de ciertas maneras, pero esto no nos permite inferir algo acerca de la realidad. Al no negar una correspondencia con la realidad, el convencionalista debe admitir que ningún sistema de clasificación resulta privilegiado respecto de otros (excepto en base a razones pragmáticas), ya que ninguno responde a cómo la naturaleza realmente es. Así, el convencionalismo se asocia con un pluralismo (no realista) de las clasificaciones. Para el convencionalista, las clases no se descubren, sino que *se construyen* (Woolgar 1988).

3.2. Realismo

El *realismo* respecto de las clases naturales viene en dos versiones principales y no excluyentes. Una de ellas (que a veces se denomina *naturalismo*) sostiene, contra el convencionalismo, que sí hay genuinas divisiones en la naturaleza. Las clases naturales

son aquellas clasificaciones que reflejan o recogen dichas divisiones naturales. Para el realista (naturalista), las clasificaciones naturales no dependen de la actividad o intereses humanos. Si una clasificación resulta útil para determinados propósitos investigativos, lo es precisamente por reflejar divisiones genuinas en la naturaleza. Por supuesto, este realismo puede ir de extremo a moderado. Un realismo (naturalismo) moderado se conforma con sostener que nuestras clasificaciones científicas capturan *algunos aspectos* de la naturaleza, o que lo hacen *imperfecta* o *aproximadamente*.

La otra forma de realismo sostiene que las clases (abstractas) mismas existen, independientemente de la existencia de sus miembros. Este sentido de realismo se vincula con el realismo en la querella medieval respecto de los universales, esto es, la discusión sobre si acaso para dar cuenta de las propiedades de los individuos (e.g. este mouse rojo) se requiere apelar a un universal (e.g. Rojo) que existe independiente de sus instancias. Esta es una postura defendida por algunos metafísicos, aunque menos popular entre filósofos de la ciencia. Para K. Hawley y A. Bird (2011), por ejemplo, las clases naturales existen como universales complejos (complejos de múltiples universales). A su vez, E. J. Lowe (2006) defiende un fundamentalismo realista según el cual las clases naturales constituyen una categoría ontológica irreducible.

Una pregunta crucial en el debate sobre clases naturales es si éstas son o no caracterizadas por una esencia. De hecho, la teoría filosófica que más ha sido discutida en el contexto de la filosofía de la ciencia (y muy en particular en filosofía de la química) es la teoría microesencialista, o esencialista microestructural.

4. Semántica y metafísica de clases naturales: el esencialismo microestructural

La visión filosófica que podemos considerar clásica de las clases naturales fue desarrollada principalmente por S. Kripke (1972, 1980) y H. Putnam (1973, 1975) quienes orientaron sus argumentos, sobre todo, desde el punto de vista de la semántica de los términos de clase –si bien sus visiones tienen implicancias y presupuestos metafísicos fuertes. Específicamente, estos autores criticaron la semántica descriptivista e internalista, desarrollada principalmente por G. Frege y B. Russell. Esta semántica sostenía que cada término de clase natural tiene asociado un conjunto de descripciones (propiedades) tales que un ítem pertenece a la clase si y solo si satisface esas descripciones. Por ejemplo, para el caso del agua, algunas descripciones asociadas tienen que ver con ser incolora, inodora,

etc. La visión es internalista en que estas descripciones son constitutivas del significado del término.

El argumento más conocido contra la semántica descriptivista es el que se conoce como argumento de la Tierra Gemela (Putnam 1975). Supongamos una Tierra Gemela, un planeta que es exactamente como la Tierra en todo respecto, con una excepción. Allí, hay una sustancia que comparte todas las propiedades macroscópicas del agua en la Tierra: tiene los mismos puntos de ebullición y de congelamiento, el mismo sabor y aspecto visual, y forma mares y ríos, cae en forma de lluvia, y soporta la vida en ese planeta. Esta sustancia es usada en la Tierra Gemela de la misma manera que nosotros usamos el agua en nuestro planeta, y los habitantes de este planeta la llaman 'agua'. Sin embargo, tiene una composición química diferente a la de aquello que llamamos 'agua' en la Tierra: en lugar de H_2O, esta sustancia tiene una composición que llamaremos XYZ. Putnam plantea entonces la siguiente pregunta: ¿cuál es la extensión del término 'agua' cuando es usado por un terrícola? ¿Y cuando lo usa un habitante de la Tierra Gemela?

Para Putnam, nuestras intuiciones señalan que cuando un terrícola dice 'agua' se está refiriendo exclusivamente al H_2O y, la misma manera, cuando un habitante de la Tierra Gemela dice 'agua' está refiriendo exclusivamente a XYZ. De lo contrario, el terrícola se vería en la situación de negar lo que la química nos enseña, es decir, que 'agua es H_2O' (y de manera análoga el habitante de la Tierra Gemela debería rechazar lo que los químicos de ese planeta enseñan, esto es, que 'agua es XYZ'). Ahora bien, dada la semejanza entre XYZ y H_2O en todos los aspectos manifiestos, XYZ satisfaría las descripciones asociadas a 'agua' en la Tierra. Sin embargo, nuestra intuición es que la extensión de XYZ no incluye H_2O y viceversa. El experimento mental muestra que, contra el descriptivismo, la satisfacción de las descripciones no basta para fijar la referencia.

Una objeción que Putnam considera es que, para los hablantes de cada planeta, hay descripciones de su microestructura que son constitutivas del significado del término en cada uno. Por ejemplo, el terrícola tendría como constitutiva la descripción 'el agua es H_2O'. Si esto es así, entonces las descripciones sí bastarían para fijar la referencia. A esta objeción Putnam contesta proponiendo la misma comparación, pero en 1750, es decir, antes de que pudiese tener lugar cualquier creencia acerca de la estructura química del agua. Previo a la revolución química, las descripciones asociadas a 'agua' no podrían

haber diferido entre terrícolas y habitantes de la Tierra Gemela. No obstante, al usar el término, las referencias varían.

A la teoría descriptivista, Kripke y Putnam oponen una *teoría causal de la referencia* la referencia de nombres propios y términos de clase se introduce en un 'bautismo inicial' en que se vinculan el término y el referente mediante ostensión (en el caso de una clase, por ejemplo, señalando una muestra y emitiendo 'agua'). Este bautismo inicia una cadena causal de comunicación a lo largo de la cual la referencia inicial se preserva y transmite entre hablantes competentes dentro de una misma comunidad lingüística que, se asume, tienen la misma intención referencial que el primer eslabón de la cadena. La caracterización del comportamiento semántico de los nombres propios y términos de clases naturales en esta teoría requiere introducir el concepto de rigidez. Kripke define 'designador rígido' como una expresión que designa al mismo objeto en todos los mundos posibles en que ese objeto existe, donde éstos se entienden como *estipulaciones contrafácticas* que surgen de imaginar qué hubiera pasado con cierto individuo en una situación diferente. Tanto los nombres propios como los términos de clase son designadores rígidos que rastrean al mismo ítem en todos los mundos posibles:

> *"Una vez que hemos descubierto que el agua (en el mundo actual) es H_2O, nada cuenta como un mundo posible en el cual el agua no es H_2O"* (Putnam 1975, p. 233).

Un presupuesto en esta idea de rigidez es que no todas las descripciones asociadas a un término son iguales: hay *propiedades esenciales* que pertenecen *necesariamente* a los objetos (*i. e.* en todos los mundos posibles en los que existan); o, dicho de otro modo, son propiedades que el objeto no podría no tener y seguir siendo el mismo objeto. Esto es lo que nos permite rastrearlo en todos los mundos posibles. La principal ventaja de esta visión es que recoge algunas intuiciones respecto de la referencia a través del cambio teórico y el progreso científico, donde el descriptivismo falla. Dado que los términos de clase refieren a esencias sin que medie ninguna descripción de los miembros de la clase (dicho de otra manera, ya que las descripciones no forman parte del significado de los términos), entonces, podemos tener descripciones falsas sin peligro para la referencialidad. Algo es una muestra de agua si tiene la estructura H_2O, y esto es el caso independientemente del estado del conocimiento científico en cualquier momento dado, es decir, era verdadero aun cuando la estructura molecular del agua se desconocía. De hecho, en muchos casos podemos individuar exitosamente una clase a partir de sus

propiedades macroscópicas, pero el microestructuralismo sostiene que ello sólo es posible gracias a las propiedades esenciales. En última instancia, los nombres propios y los términos generales designan esas esencias.

Este esencialismo kripkeano tiene algunas peculiaridades. Las esencias no son propiedades comúnmente consideradas 'más importantes' (algo que quizás podría sostener un esencialista descriptivista), sino algo diferente. En el caso de los términos de clases naturales, su esencia es alguna propiedad del orden microestructural. De hecho, otras propiedades que podrían considerarse 'más importantes' resultan todas ser accidentales en esta visión: Marx pudo, por ejemplo, no haber escrito 'El Capital' y seguiría siendo el mismo individuo. Una clase natural, por ejemplo, el agua, podría carecer, en otros mundos, de todas las propiedades fenomenológicas que comúnmente le atribuimos; pero no podría no ser H_2O; o, similarmente, el tigre podría no tener el patrón de rayas con que por lo común lo identificamos, mientras que en todo mundo posible tiene la misma estructura interna. De los ejemplos que se han dado (agua, tigre, oro) se desprende que aquella estructura interna o microestructura que constituye las esencias proviene de los resultados de las ciencias empíricas, en el sentido de que son descubiertas por estas ciencias. Este esencialismo microestructural es, por lo tanto, 'cientificista'.

La relación precisa entre el esencialismo y la rigidez es un punto de discusión; muchos acuerdan en ninguna implica la otra, y algunos sugieren que el esencialismo es un compromiso previo. La idea es: si existen esencias individuales, entonces, si los nombres designan esas esencias, son designadores rígidos. (Orlando 1999). El antecedente en la formulación anterior es clave. La teoría clásica de las clases naturales asume que es tarea de las ciencias especiales descubrir esencias. La química y la biología tienen particulares problemas con esta aseveración, como veremos en la sección siguiente.

5. Las clases químicas como desafíos al esencialismo microestructuralista

En la discusión sobre clases naturales en química, el microestructuralismo esencialista se entiende como la tesis de que las clases químicas se individúan exclusivamente a partir de sus propiedades microestructurales. (Hendry 2006). Emma Tobin refina esta idea en términos que incorporan la idea de que esas propiedades individuatorias son, además de microestructurales, esenciales:

"Si K es una clase química, entonces hay un conjunto de propiedades $s_1...s_n$ que constituyen la esencia de K tal que la posesión de esas propiedades es necesaria y suficiente para la pertenencia a K y estas propiedades son todas microestructurales" (Tobin 2010, p. 44).

Como vimos, en la visión clásica, la química ofrece los ejemplos paradigmáticos preferidos de clases naturales con una esencia microestructural: el número atómico Z para los elementos (la esencia del oro es el Z = 79), y la composición para los compuestos (la esencia del agua es la composición H_2O). Muchos filósofos de la química han identificado serios problemas para esta visión, de lo que nos ocupamos en esta sección. Ahora bien, aunque los ejemplos que se encuentran en la literatura sobre clases naturales son diversos, yendo de elementos (e.g. hidrógeno) y compuestos (e.g. agua), a grupos funcionales (e.g. hidróxilo) o clasificaciones más amplias (e.g. metales), las críticas a la visión clásica no están siempre dirigidas a todos los ejemplos a la vez. Aquí vamos a ver algunos de los problemas más importantes, precisando bien cuál es el blanco de cada argumento.

5.1. Elementos químicos como clases naturales

- ***El problema de los iones***

A veces se considera que los elementos químicos constituyen el caso más fácil para el microestructuralismo. Sin embargo, la idea del número atómico Z como propiedad esencial y criterio de individuación de los elementos se ve amenazada por consideraciones respecto de la importancia del número de electrones de los átomos. En efecto, muchos consideran que buena parte de las propiedades químicamente interesantes de los elementos no dependen de su núcleo (protones) sino de sus electrones. El microesencialista podría defender su criterio objetando que el número de electrones es igual al número de protones (es decir, es igual a Z), pero esto solo funciona para los átomos eléctricamente neutros, y falla en el caso de los iones. Sin embargo, los iones no solo no son excepcionales, sino que son cruciales en los fenómenos bioquímicos. Martínez González y Córdoba sintetizan

"no es claro por qué especies químicas de comportamientos muy diferentes deben considerarse miembros de una misma clase natural definida por una propiedad, el número atómico, que no se relaciona con tales comportamientos" (2016, p. 99).

5.2. Compuestos químicos como clases naturales

Además de los elementos, la literatura ha discutido bastante el caso de los compuestos (recuérdese que la visión clásica aludía al ejemplo del agua). En el caso de los compuestos, el esencialismo se enfrenta también a problemas.

- ***El problema de la heterogeneidad a nivel molecular: el agua no es H2O***

El problema que vimos para el caso de los elementos se extrapola a los compuestos. De la misma manera que la existencia de iones dificulta la individuación de elementos a partir de Z, la individuación de los compuestos en los que pueden darse variantes isotópicas a partir de Z es problemática. En pocas palabras, el problema es que la composición es una condición insuficiente, y que a menudo son necesarias consideraciones del orden macroscópico para dar cuenta de cómo se individua una clase.

Si tomamos el caso del agua, el hidrógeno y el oxígeno tienen, ambos, tres variantes isotópicas. El hidrógeno puede presentarse con un protón y un electrón (H), pero también con un protón, un electrón, y un neutrón (deuterio, D), o con dos neutrones, un protón, y un electrón (tritio, T). Por su parte, el oxígeno tiene tres isótopos estables con el mismo número (8) de protones y electrones: un isótopo con 8 electrones (^{16}O), otro con 9 (^{17}O), y otro con 10 (^{18}O). En cualquier muestra de agua encontraremos una mezcla de diversos isótopos, como H3O+ y OH−. ¿En qué sentido puede ser verdadero que el agua es H_2O? M. Weisberg argumenta que los isótopos tienen comportamientos químicos y termodinámicos muy semejantes, y que las reacciones que ocurren naturalmente, a menudo, no distinguen entre ellos.

El microestructuralista podría considerar que el agua es H_2O, y que cualquier isótopo que pueda encontrarse en una muestra debe ser considerado una impureza. Para Weisberg, esta opción no tiene nada de natural, ya que la noción misma de pureza debería ser tal que refleje las distribuciones que de hecho encontramos en muestras de agua. Esto ha conducido a la famosa afirmación de que el agua no es H_2O (Weisberg 2006, Hendry 2006).

- ***El problema de las estructuras dinámicas***

Los isómeros complican al microestructuralismo si se asume que la estructura de los compuestos químicos es siempre estática, pero surge un problema diferente si se cuestiona esto último. P. Needham (2000, 2008) y J. van Brakel (2000) han argumentado

contra el microestructuralismo en base a un análisis del carácter dinámico de los compuestos. Para estos filósofos, el agua no puede ser pensada como esencialmente compuesta por moléculas de H_2O (estáticamente). Las moléculas de H_2O en agua líquida forman cadenas (oligómeros) mediante puentes de hidrógeno. Estas cadenas de puentes de hidrógeno son responsables de muchas propiedades químicamente relevantes del compuesto, pero no son algo estático. Por el contrario, están constantemente formándose y rompiéndose, y cómo se dan estos procesos depende del contexto (no de la composición molecular del agua). Van Brakel y Needham van más lejos, y defienden que el agua es identificada a nivel macroscópico, porque solo entidades macroscópicas pueden tener las propiedades termodinámicas que nos interesan al clasificarlas (Una consecuencia de esta visión es que una sola molécula de H_2O no cuenta como agua).

- ***El problema de las formas alotrópicas***

La alotropía es otro problema que encontramos en los compuestos. Algunos elementos pueden formar agregados que contienen todos los mismos tipos de átomos, pero unidos de formas diferentes. El carbono es un caso notable porque tiene muchas formas alotrópicas, por ejemplo, grafito y diamante. En todos los casos, se trata de átomos con $Z = 6$, pero los átomos están unidos de distintas maneras formando distintas estructuras moleculares (hexagonal, tetraédrica, respectivamente). El comportamiento macroscópico del carbono en sus distintas formas alotrópicas varía, y esta variación depende de la estructura espacial de la molécula que conforman y no del número atómico (Hendry 2015). Pero, además, esto trae problemas para la clasificación de ciertos compuestos en clases más abarcadoras. El estaño tiene dos variantes alotrópicas, que se conocen como estaño blanco y estaño gris: el estaño blanco es metálico, pero el estaño gris es un no metal.

Una posible reacción tanto al problema de las formas alotrópicas como al problema de las estructuras dinámicas (desde el punto de vista microestructuralista) es incluir dentro de lo que se considera microestructura todo aquello que resulta problemático. Es decir, considerar como parte de la microestructura los enlaces y las formas moleculares. Pero esto implica considerarlos intrínsecos a las moléculas, lo cual no parece correcto. La forma molecular, por ejemplo, depende las condiciones ambientales (por ejemplo, en fase gaseosa, el amoníaco (NH_3) tiene una forma plana, mientras que presenta una forma piramidal en una solución acuosa, Tobin 2010).

- ***El problema del isomerismo óptico***

Los compuestos con la misma fórmula empírica (que indica su constitución en términos de elementos y proporciones) pueden en ocasiones diferir no solamente en cómo están unidos sus átomos (alótropos) sino también en términos de su disposición espacial. Un par de isómeros ópticos, por ejemplo, tienen la misma composición y las mismas conexiones entre sus átomos, pero presentan quiralidad, es decir, constituyen imágenes especulares que no se pueden superponer (tal como ocurre con nuestras manos derecha e izquierda). Un par de isómeros tienen muchas propiedades en común, pero se comportan de manera diferente con la luz polarizada (y esto alcanza para que la diferencia entre dos isómeros ópticos sea crucial en reacciones bioquímicas. Tal como argumentan Martínez González y Córdoba (2016), uno esperaría que una descripción microestructural a nivel cuántico arrojara la diferencia entre un par de isómeros ópticos. Sin embargo, este no es el caso, ya que esta descripción arroja los mismos valores de energía para ambos. Para los filósofos, esto suscita la pregunta de qué tan 'micro' hay que ir en la caracterización de la microestructura.

5.3. Más allá de los elementos y los compuestos

Los químicos también utilizan muchas otras clasificaciones, como grupos funcionales, ácidos o bases, metales o no metales, entre otras. Es clasificaciones, aunque menos discutidas por los filósofos, son cruciales para los químicos, y también plantean desafíos para el microestructuralismo. Hasok Chang (2012) ha estudiado en detalle el caso del par ácido-base y las múltiples definiciones de acidez y alcalinidad. Chang muestra que algunas de estas nociones están más caracterizadas por descripciones cotidianas que a nivel microestructural, y favorece una posición pluralista al respecto que se opone a cualquier forma de esencialismo microestructuralista. Otros examinan clasificaciones del orden *macro*molecular, más cercanas a la bioquímica, tales como las enzimas, que el microesencialismo debiera poder acomodar también, pero donde se vuelve aún menos plausible (Tobin 2010).

6. Respuestas microesencialistas y otros problemas: realismo científico y reduccionismo

A pesar de las críticas, el esencialismo microestructuralista continúa teniendo algunos defensores. Hendry (2006) considera que el problema de los isótopos ha sido exagerado en la literatura, especialmente en los análisis del caso del agua que involucran las

variantes del hidrógeno. Propone que la diferencia en el comportamiento de variantes isotópicas es cuantitativa más que cualitativa, y que (siguiendo una sugerencia anterior de Paneth) la carga atómica constituye un buen criterio microesencialista:

> *"Entonces, el efecto isotópico del hidrógeno es un caso extremo: un monstruo, no un paradigma. En otros casos, la carga atómica es por mucho el determinante del comportamiento químico, y el peso atómico es un factor despreciable"* (Hendry 2006, p. 868).

Esto permite ubicar al hidrógeno y al deuterio como pertenecientes a una misma clase, ya que tienen la misma carga nuclear (y de manera compatible con la directiva de la IUPAC respecto de los isótopos). No acepta, sin embargo, que el microesencialismo sea igualmente plausible para los compuestos dado el problema de la heterogeneidad a nivel molecular que vimos en la sección anterior. Otros siguen la sugerencia de Hendry, pero advierten que sería más adecuado analizar los elementos caso por caso para ver si pueden satisfacer el criterio de la carga atómica como esencia microestructural. Aquí hay una novedad importante respecto de los argumentos esencialistas clásicos, ya que se reconoce que no todas las clasificaciones químicas pueden ser analizadas de la misma manera. Los críticos del microesencialismo, como vimos, ya distinguían entre problemas suscitados por los elementos y problemas suscitados por los compuestos; pero el reconocimiento viene aquí por parte de sus defensores. Que algunos elementos satisfagan un determinado criterio microesencialista no implica que todos los elementos lo hagan, ni que éste sea el único (Tahko 2015).

C. Hoefer y G. Martí (2019) tienen una visión semejante, y consideran que el microesencialismo puede defenderse de ciertas acusaciones *en algunos casos*. Sobre todo, consideran que la visión Kripkeana/Putnamiana ha sido leída de manera muy poco caritativa por parte de los filósofos de la química. Ellos sugieren que aún hay lugar para defender una visión microestructuralista incluso si la historia fuese más compleja que 'agua = H_2O', y que el mismo Putnam ya había advertido que estaba presentando una visión intencionalmente simplificada que críticos ulteriores tomaron de manera literal. En realidad, muestran, Putnam nunca realmente pensó en el agua como una 'pila' de moléculas de H_2O sino que su expresión original fue 'moléculas de H_2O, *o algo así'*, dejando lugar a todas las precisiones químicas necesarias. Para Hoefer y Martí, al menos en el caso del agua, dar estas precisiones es complejo pero posible:

> *"Las muestras de agua necesariamente consisten, predominantemente, en moléculas de H_2O (tanto orto-agua como para-agua), en varias configuraciones poliméricas, más sus productos disociativos H^+, H_3O^+ y OH, con cantidades menores de compuestos isotópicos tales como H_2, ^{17}O, D_2, ^{16}O (etc.), con concentraciones relativas de estos componentes estabilizándose en rangos característicos que dependen de la temperatura, de la presión, y de las impurezas y/o campos electromagnéticos presentes"* (Hoefer y Martí, 2019, p. 9)

Independientemente de esta sugerencia particular para complejizar la visión microestructuralista del agua, Hoefer y Martí plantean una defensa más general del esencialismo. En efecto, y contra algunas críticas de que la complejidad de la ciencia química real no da lugar al esencialismo, los autores sostienen que la intuición de que existen esencias es una presuposición ineludible para defender el realismo científico. De hecho, la intuición de que existen esencias es, para ellos, equivalente a la suposición de que existe una explicación para las propiedades estables y confiables de muchas clases químicas. Que las esencias resulten ser mucho más complejas de lo que creíamos es, aunque cierto, irrelevante. Insisten en que aun cuando haya casos en que distintas microestructuras originan unas mismas características macroscópicas, esto no es la regla sino la excepción, y por lo general la microestructura determina y explica las propiedades macroscópicas de una forma unívoca.

Una vinculación muy estrecha entre realismo científico y clases naturales ya había sido defendida por S. Psillos (1999), a tal punto que resultan inseparables: para el autor, el realismo científico se compromete con que el mundo está estructurado en clases naturales. Para otros, el realismo de las clases naturales es una tesis distinta, adicional a la tesis del realismo científico. En esta visión, el realismo científico se comprometería con la existencia de entidades y procesos independientes de la mente, y el realismo de las clases naturales añade que nuestros criterios para agruparlos e individuarlos son igualmente independientes de la mente (Chakravartty 2011).

Como hemos visto, una gran parte de la discusión en torno a las clases en sentido microesencialista recae en consideraciones sobre la relación entre el micro- y el macro-nivel. En efecto, la cuestión de las clases naturales químicas (y más específicamente, la cuestión del microesencialismo) también se ha pensado desde el punto de vista de la reducción de la química a la física *versus* la autonomía del mundo químico (Lombardi y

Labarca 2005). Tahko considera que el esencialismo, en última instancia, requiere establecer la verdad de un principio según el cual hay una correlación 1:1 entre las propiedades químicas de una sustancia y su microestructura (o esencia). Muchos argumentos antirreduccionistas, en general, proceden mostrando que las relaciones son, mayoritariamente, 'muchos-a-muchos' (y algunos de los argumentos contra la visión microesencialista de las clases químicas tienen también esa forma)[5]. Más aun, sugiere Tahko, dado que el microesencialismo asume que las propiedades esenciales *explican* el resto de las propiedades (macroscópicas, no esenciales), se requiere también una historia de cómo, exactamente, unas propiedades determinan las otras.

7. Conclusiones

A lo largo de este capítulo vimos las características tradicionalmente asociadas a la idea de clase natural, identificando aspectos epistémicos, metafísicos, y semánticos, e hicimos especial énfasis en el microesencialismo y sus problemas. Esta disputa entre aceptar o negar la existencia de genuinas clases naturales químicas en sentido clásico apunta a una peculiaridad del debate en filosofía de la química. Mientras que la biología (la otra gran fuente de ejemplos paradigmáticos para la filosofía) cuenta con razones teóricas muy fuertes para rechazar la postulación de esencias (i.e., razones evolutivas), en general se asume que la química es el mejor candidato para el esencialismo. Sin embargo, la filosofía de la biología no ha abandonado la identificación de clases naturales, sino que se ha orientado hacia teorías filosóficas alternativas. El debate en filosofía de la química, por el contrario, gira casi exclusivamente en torno a defender o criticar el microesencialismo clásico. En este sentido, explorar otras conceptualizaciones de las clases naturales, que permitan salvar la intuición mínima de que *no todas las clasificaciones son iguales*, sea una forma de hacer avanzar el debate en filosofía de la química.

Referencias bibliográficas

Chakravartty, A. (2011). "Scientific Realism and Ontological Relativity". *The Monist*, 94 (2): 157–180.

Chang, H. (2012). "Acidity: The Persistence of the Everyday in the Scientific". *Philosophy of Science,* 79 (5): 690–700.

Goodman, N. (1955). *Fact, Fiction, and Forecast*. Cambridge, MA: Harvard University Press. Hawley,

Hawley, K. y Bird, A. (2011). "What are Natural Kinds?". *Philosophical Perspectives*, 25: 205–221.

Hendry, R. (2006). "Elements, Compounds and Other Chemical Kinds". *Philosophy of Science*, 73 (5): 864–875.

[5] Para mayores detalles, véase el Capítulo 4.

Hendry, R. F. (2015). “Are Chemical Kinds Natural Kinds?”. En: U. Mäki, I. Votsis, S. Ruphy, y G. Schurz (eds.), *Recent Developments in the Philosophy of Science: EPSA13 Helsinki*, Springer International Publishing Switzerland, pp. 251-261.

Hoefer, C. y Martí, G. (2019). “Water has a microstructural essence after all”. *European Journal for Philosophy of Science*, https://doi.org/10.1007/s13194-018-0236-2.

Kripke, S. (1972). “Naming and Necessity”. En: G. Harman y D. Davidson (eds.), *Semantics of Natural Language*, Reidel, Dordrecht, pp. 253–355.

Kripke, S. (1980). *Naming and Necessity*. Basil Blackwell, Oxford.

Lombardi, O. y Labarca, M. (2005). “The Ontological Autonomy of the Chemical World”. *Foundations of Chemistry*, 7 (2): 125–148.

Lowe, E. J. (2006). *The Four–Category Ontology: A Metaphysical Foundation for Natural Science.* Oxford: Clarendon Press.

Martínez González, J. C., y Córdoba, M. (2016). “El Problema de las Clases Naturales en Química: Algunas Dificultades para el Microestructuralismo”. *Crítica, Revista Hispanoamericana de Filosofía*, 48 (144): 89-117.

Needham, P. (2000). “What is Water?”. *Analysis,* 60 (265): 13–21.

Needham, P. (2008). “A Critique of the Kripke/Putnam Conception of Water”. En: van Brakel, J. y Ruthenberg, K. (eds.), *Stuff: The nature of chemical substances.* Würzburg: Königshausen und von Neumann, pp. 93–105.

Orlando, E. (1999). *Concepciones de la referencia*. Buenos Aires: Eudeba.

Psillos, S. (1999). *Scientific Realism: How Science Tracks Truth*. Routledge.

Putnam, H. (1973). “Meaning and Reference”. *Journal of Philosophy*, 70: 699–711.

Putnam, H. (1975). “The Meaning of Meaning”. En *Philosophical Papers Volume 2*, Cambridge University Press, pp. 215–271.

Quine, W. O. (1969). *Ontological Relativity and Other Essays.* New York: Columbia University Press.

Tahko, T. (2015). “Natural Kind Essentialism Revisited”. *Mind*, 124 (495): 795–822.

Tobin, E. (2010). “Microstructuralism and Macromolecules: The case of moonlighting proteins”. *Foundations of Chemistry*, 12: 41–54.

Van Brakel, J. (2000). *Philosophy of Chemistry*. Leuven: Leuven University Press.

Weisberg, M. (2006). “Water is not H_2O”. En: D. Baird, E. Scerri y L. McIntyre (eds.), *Philosophy of Chemistry: Synthesis of a New Discipline*. Springer, Dordrecht, pp. 337–345.

Woolgar, S. (1988). *Science: The Very Idea*, London: Tavistock.

CAPÍTULO 8

Modelos en química: el problema de la electronegatividad

Hernán Accorinti y Martín Labarca

CONICET – Universidad de Buenos Aires

1. Introducción

La electronegatividad (EN) se ha constituido gradualmente en una herramienta indispensable en cada campo teórico y experimental de la química, y ha encontrado aplicaciones también en física, ingeniería y biología. En el ámbito de la química, el concepto de EN ha sido utilizado para explicar propiedades como la acidez de los solventes, los mecanismos de reacción, la distribución electrónica, las polaridades de enlace y la periodicidad química, entre otros. Sin embargo, el hecho de que la EN no pueda medirse directamente sino sólo indirectamente a través de otras propiedades como la entalpía, la afinidad electrónica o la energía de ionización, ha dado lugar a una proliferación de modelos muy diversos y, junto con ello, a un incomprensión respecto de lo que la noción misma de EN implica.

El conjunto de modelos desarrollados ha dado lugar a varios trabajos de revisión y clasificación (*cfr.* Batsanov y Batsanov, 2012; Cherkasov, Galkin, Zueva y Cherkasov, 1998; Mullay, 1987; Politzer y Murray, 2018; Pritchard y Skinner, 1955; Ruthenberg y Martínez González, 2017). En términos generales, es posible afirmar que es posible agruparlos en modelos termoquímicos, modelos espectroscópicos o geométricos y modelos cuánticos. Los valores numéricos de los múltiples modelos existentes generan una escala (denominada escala de EN) en la que se muestra, en general, un mismo ordenamiento de todos los elementos de la tabla periódica. Esta propiedad periódica muestra que la EN aumenta de izquierda a derecha a lo largo de un periodo y generalmente disminuye en un grupo de arriba hacia abajo.

Sin embargo, eso no generó una mejor comprensión respecto de la *intensión* y la *extensión* del concepto. En relación con su intensión, la EN ha sido definida de diversos modos ya sea como una propiedad, una capacidad, un poder de atracción, un poder de expulsión o como el resultante de una tensión entre propiedades del átomo. Asimismo, la

extensión, es decir la referencia del concepto tampoco es clara: ¿es el átomo, la molécula, un grupo, un ión o bien la especie química?

En el presente capítulo presentaremos y analizaremos tres modelos especificando los problemas que presentan. Lo particularmente inquietante en relación con los modelos es que los mismos brindan descripciones diferentes, y en algunos casos incompatibles, de la EN. Siendo que, según la literatura estándar (Contessa, 2007; Frigg, 2002; Frigg y Hartmann, 2006; Giere, 2004), los modelos científicos generan algún tipo de conocimiento en tanto y en cuanto representan al sistema que pretenden estudiar, en los casos de modelos incompatibles se hace difícil entender qué y cómo aprendemos de ellos (Morrison, 2011). Estas temáticas serán abordadas del siguiente modo. En el apartado dos describiremos tres modelos clásicos de la EN: Pauling, Mulliken y Allred-Rochow. En el tercer apartado, comenzaremos reseñando el problema de la representación. A continuación, abordaremos la problemática en torno al carácter representativo de modelos empíricamente equivalentes pero incompatibles, analizando precisamente los tres modelos mencionados. Algunas alternativas de solución a este problema son revisadas y, finalmente, esbozaremos algunas reflexiones finales sobre este tópico.

2. *Modelos clásicos*

2.1. El enfoque termoquímico: el modelo de Pauling

Si bien el término 'electronegatividad' se asocia naturalmente al nombre de Linus Pauling, su origen puede encontrarse en los trabajos de Avogadro y Berzelius en las primeras décadas de 1800. Según Jensen (1996), el concepto probablemente debe su nombre a este último, quien en su libro *Lehrbuch der Chemie* (1836) publicó una lista de 54 elementos ordenados en una escala. Las primeras mediciones empíricas de la electronegatividad fueron realizadas por Worth Rodebush en 1925 y Groves Cartledge en 1928 (Jensen, 2012). En 1932 fue precisamente el premio Nobel Linus Pauling el primero en cuantificar una escala de electronegatividad sobre la base de un enfoque termoquímico utilizando los calores de disociación o formación de sustancias heteronucleares del tipo A_nB_m.

Su punto de partida es un enlace covalente en el cual no hay transferencia de electrones. Dicho enfoque sigue dos supuestos. El primero es el de enlace covalente simple normal entre dos sustancias A y B sin ningún componente iónico. El segundo

supuesto está basado en el llamado 'postulado de aditividad' (Pauling y Yost, 1932), según el cual la energía de un enlace covalente simple normal en un enlace heteronuclear era muy cercana al promedio aritmético de las energías de los enlaces entre los átomos iguales (enlace homonuclear); de este modo, resulta:

$$E\ (A{:}B) = \tfrac{1}{2}\ (E\ [A{:}A] + E\ [B{:}B])$$

Sobre esta base, la escala de Pauling se construye en términos de la diferencia entre la energía actual del enlace covalente y la energía del enlace covalente normal, cualesquiera sean las dos sustancias. La energía actual del enlace covalente se obtiene termoquímicamente considerando la energía requerida para romper el enlace molecular. La energía del enlace covalente normal se calcula teóricamente mediante el postulado de aditividad. Para Pauling

> *"si el postulado de aditividad es correcto, la diferencia (Δ) entre la energía actual del enlace covalente y la que predice el postulado de aditividad debe ser cero o positiva, y a mayor carácter iónico del enlace, mayor será el valor de Δ [...] los valores de Δ suelen conocerse con mayor precisión que las propias energías de enlace, ya que pueden medirse como calores de reacción"* (Pauling 1932, p.3572).

De este modo entonces, Pauling generaba la primera escala de EN sobre la base de los valores de Δ. Asumiendo que Δ está relacionado a las diferentes formas en que los electrones de enlace se comparten en las sustancias A y B, Δ se constituye como una medida de la EN (χ) de los elementos. Las diferencias de EN entre A y B se definen formalmente como:

$$\Delta E = E_{AB} = E_{(AB)\,exp} - \tfrac{1}{2}\,[E_{AA} + E_{BB}]$$

$$\Delta E = (\chi_A - \chi_B)^2$$

$$|\chi_A - \chi_B| = 0{,}208\ \Delta E^{1/2}\ \ (eV) \quad (1)$$

donde χ_A y χ_B son las electronegatividades de los átomos A y B, respectivamente. Esta descripción brinda solamente diferencias de EN. Para obtener el valor absoluto es necesario postular a un elemento como valor de referencia. Para ello, Pauling adoptó el elemento hidrógeno con un valor de $\chi = 0$. Posteriormente, en función de los datos obtenidos por Mulliken en 1934 (Bergmann y Hinze, 1996) y para evitar valores negativos de χ para la mayoría de los metales, dicho valor se modificó a $\chi = 2{,}1$. Allred

(1961) actualizó las EN de 69 elementos a partir de datos termodinámicos más adecuados y el hidrógeno adoptó un valor final de 2,2.

Los valores de electronegatividad de Pauling para los elementos fueron aceptados rápidamente por la comunidad química porque una gran cantidad de información química podía ser correlacionada y racionalizada en términos de electronegatividades. Al mismo tiempo, Pauling definía entonces los valores de EN como *"números que representan el poder [que poseen los elementos] de atraer electrones en un enlace covalente, por medio del cual se puede estimar la cantidad de carácter iónico parcial del enlace"* (Pauling 1950, p.236).

La definición de Pauling dejaba naturalmente sin valores de EN a los elementos pertenecientes a la familia de los gases nobles. Allen y Huheey (1980) abordaron el problema proponiendo modificar la definición anterior como *"el poder de un átomo en una molécula para atraer o retener electrones"* (p.1523). Esta extensión en la conceptualización brindó significado físico para poder asignar valores numéricos de EN a los gases nobles en dicho modelo, tarea que llevaron adelante varios autores a través de distintos procedimientos (*cfr.* por ejemplo, Allen y Huheey, 1980; Fung, 1965; Meek 1995).

2.2. El enfoque espectroscópico: el modelo de Mulliken

El siguiente intento de cuantificación fue llevado a cabo por el premio Nobel Robert Mulliken (1934), quien dos años más tarde diseñó una escala sobre un dominio geométrico o espectroscópico. A diferencia de Pauling, Mulliken construyó su escala utilizando dos propiedades atómicas: la energía de ionización (I) y la afinidad electrónica (A). Su punto de partida fueron dos sistemas neutros X e Y que tienen iguales valores de EN. En este caso, los cambios de energía en las dos reacciones deberían ser idénticos:

$$X + Y \rightarrow X^{+} + Y^{-} \quad \text{y} \quad X + Y \rightarrow X^{-} + Y^{+}$$

Por el principio de igual energía (si X e Y tienen la misma EN)

$$X^{+} + Y^{-} = X^{-} + Y^{+}$$

De manera que: $Ix – Ay = Iy – Ax$ y del mismo modo $Ix + Ay = Iy + Ax$

De donde resulta la expresión formal:

$$\chi_{M} = ½ (Iy + Ay) \qquad (2)$$

De acuerdo con esta nueva conceptualización, afirmaba: *"dos átomos univalentes tienen la misma electronegatividad si la suma (o promedio) del potencial de ionización más la afinidad electrónica es la misma para cada uno"* (Mulliken, 1934, p. 783). Mulliken establecía así una escala de electronegatividades atómicas (es decir, 'absolutas') ya que no dependía de una valor arbitrario de referencia, como sucedía en la escala de Pauling. Teniendo en cuenta las propiedades atómicas empleadas, intuitivamente este enfoque describe la tensión de un átomo entre su tendencia a ganar o a perder electrones. Mulliken denomina a esta tendencia 'electroafinidad'. Dado que el potencial de ionización (I) y la afinidad electrónica (A) son propiedades atómicas, por lo tanto, la electronegatividad es también una propiedad del átomo.

La escala de Mulliken tuvo una amplia aceptación ya que empleaba un formalismo muy sencillo y razonable. Se determinaron los valores de EN de 11 elementos para los cuales existían valores de afinidad electrónica. Otra ventaja es que con este enfoque es posible determinar valores de EN para átomos en cualquier estado de valencia en la molécula. Sin embargo, la escala se vio limitada durante mucho tiempo porque aún en 2006 existían sólo los valores de afinidad electrónica de 57 elementos (Salas-Bannuet, Ramírez-Vieyra y Noguez-Amaya, 2011).

2.3. El enfoque espectroscópico: el modelo de Allred-Rochow

Algunos años más tarde, varios autores proponían definir la EN como la relación Z_{eff} / r^n, donde Z_{eff} representa la carga nuclear efectiva, r el radio atómico y n el número de electrones de valencia. La idea era reconciliar la EN termoquímica con estas escalas denominadas 'geométricas de electronegatividad' a partir de distintos valores de n. Uno de los pioneros fue Walter Gordy (1946), quien examinó la posibilidad de definir la EN de un átomo neutro en una molécula. El formalismo general es el siguiente:

$$\chi = a\, Z_{eff} / r^n + b \qquad (3)$$

donde a y b son los coeficientes lineales que relacionan los valores de EN con las mediciones electroquímicas. La 'electronegatividad geométrica' relaciona la disposición geométrica del núcleo con los electrones de valencia.

En la misma dirección, otro modelo ampliamente conocido y muy citado es el que propusieran Louis Allred y Eugene Rochow (1958). Este modelo tiene la misma base que el de Gordy aunque la diferencia radica en la forma en que se obtienen los valores de Z.

Para estos autores, los valores de *n* en la ecuación (3) se obtienen utilizando las reglas de Slater. Estas dos escalas fueron las primeras en introducir el concepto de 'fuerza' para la cuantificación de electronegatividades. En particular, Allred y Rochow afirmaron que el uso de la fuerza electrostática era consistente con la definición de Pauling, ya que medía la tendencia a atraer electrones. Y, en efecto, ajustaron los valores de los coeficientes *a* y *b* para establecer una correlación lineal con la escala de Pauling, que veremos más adelante.

3. Modelos incompatibles y representación

3.1. ¿Qué es representar?

La literatura epistemológica de los últimos años se focalizó específicamente en dos conceptos claves para dar cuenta del modo de producción actual del conocimiento científico: la noción de modelo y la noción de representación. Tanto la concepción semántica (da Costa y French, 2000; Frigg, 2006; Stegmuller, 1979; Suppe, 1989; van Fraassen, 1989), al definir las teorías a partir del conjunto de sus modelos, como la concepción modelística (Morgan y Morrison, 1999), que aboga en favor de pensar los modelos como agentes autónomos del conocimiento, coadyuvaron a canonizar los modelos como el principal elemento articulador del conocimiento científico. Sin embargo, fue esta última tradición de investigación la que más contribuyó a imponer una imagen científica en donde ya no sean las leyes fundamentales de las teorías sino los modelos parciales los auténticos portadores del conocimiento. Los modelos científicos, haciendo uso de los principios teóricos generales, generan marcos de referencias más específicos para dar cuenta de situaciones concretas. Esta capacidad de los modelos para circunscribir las generales y abstractas leyes científicas a aspectos específicos del mundo se interpretó como un indicio de la capacidad representativa de los modelos. En este sentido, la potestad cognoscitiva de estos radicaba en su representatividad. Siendo así, la discusión en torno de los modelos científicos derivó en una discusión vinculada a la noción misma de representación.

Dos grandes líneas de investigación surgieron en relación con esta problemática. Desde una concepción estructuralista (da Costa y French, 2000; French, 2003, 2013; van Fraassen, 1989) se supuso que la garantía del representar estaba dado por algún tipo de morfismo (ya sea isomorfismo, isomorfismo parcial u homomorfismo) entre el modelo y el sistema de estudio. Otra forma de entender la representación fue pensar que la

propiedad distintiva para determinar la capacidad representativa de los modelos era la similitud (Giere, 2004). Sin embargo estas caracterizaciones no resultaron por sí mismas satisfactorias. Por un lado, las propiedades lógicas de los diferentes morfismos y de la similitud diferían respecto a las de la representación (*cfr.* para más detalles, Suárez, 2003). Por otro lado, ninguna distinción establecía condiciones suficientes ni necesarias del representar ya que existen situaciones en donde hay similitud o isomorfismo sin representación y situaciones en donde hay representación sin similitud ni isomorfismo (Frigg, 2002; Suárez, 2003). El problema general estriba en que el isomorfismo oscila entre la rigurosidad propia del formalismo que supone y la problemática flexibilidad y laxitud inherente a la similitud. En efecto, el enfoque basado en el isomorfismo, motivado por la idea de establecer la relación de representación sobre rigurosas relaciones formales, se encuentra, precisamente como consecuencia de tal rigurosidad, con sus propias limitaciones. Por ejemplo, entre otras cosas no puede dar cuenta de las distorsiones dadas por los procesos de idealización y abstracción inherentes a todo modelo científico (*cfr.* Frigg, 2002; Lombardi, Accorinti y Martínez González, 2016; Suárez, 2003). Pero en su intento por dar respuesta de tales limitaciones mediante la postulación de isomorfismos parciales u homomorfismos, el enfoque estructural flexibiliza de tal modo los criterios que contrae los mismos problemas propios de la similitud que en un principio pretendía evitar. La similitud establece débiles criterios, ya que siendo que todo puede ser trivialmente similar a todo en algún sentido no relevante, se establecería como condición tanto de la representación como de la no representación. Del mismo modo, como afirma Contessa (2006), dos estructuras parciales cualesquiera son trivialmente isomorfas siempre que los aspectos discordantes se mantengan indeterminados en los respectivos sistemas. En este sentido, el isomorfismo parcial o el homomorfismo también se muestran en sí mismos infructíferos, ya que bajo tales criterios cualquier modelo podría representar cualquier sistema.

Algunos autores (Callender y Cohen, 2006) asimilan el golpe y adoptan una postura extrema asociando la representación con la mera estipulación o denotación. Sin embargo, esta no es la posición dominante. Steven French (2003), por ejemplo, critica esta postura apelando a la necesaria objetividad propia de los modelos científicos afirmando que *"no cualquier cosa sirve como un modelo científico de un sistema físico: si no se cumplen las relaciones apropiadas entre las propiedades relevantes entonces el modelo no será considerado científico"* (p.1478).

La solución a las problemáticas planteadas recientemente se erigieron sobre la base de dos pilares diferentes aunque convergentes. El primero de ellos fue adoptar una perspectiva pragmática de modo tal que la representación ya no se constituya mediante una relación diádica entre sistema y modelo, sino como una relación triádica en donde el agente usa un modelo para representar al sistema. Desde esta perspectiva, Giere (2010) condujo a fundar la peculiaridad de la representación en la intencionalidad del agente al modo de "C usa S para representar T con un propósito X ". El segundo pilar que vino a complementar esta caracterización evidenciando que la denotación, si bien necesaria no es suficiente, es la capacidad de establecer inferencias desde el modelo hacia el sistema que se está estudiando. En esta línea, Suarez (2004) afirma que A representa B si (1) la fuerza representacional de A nos orienta o apunta a B (o sea, si la fuente A es capaz de guiar a un usuario competente e informado para poner en consideración al sistema B), y si (2) A permite hacer inferencias científicas sobre B. El primer punto rescata el aspecto intrínsecamente denotativo del acto de representar, es decir que la representación tiene un componente intencional y no puede reducirse al mero análisis de las propiedades objetivas que pueden presentar modelo y sistema. El segundo, también con fuertes consideraciones pragmáticas, identifica la capacidad de realizar inferencias desde la fuente (el modelo) al sistema como el rasgo distintivo de la representación.

No obstante, la perspectiva deflacionaria promulgada por Suárez precisamente por no brindar condiciones suficientes y necesarias para la representación no fue unánimemente aceptada. Según Contessa (2007), un buen criterio de la representación, además de brindar condiciones necesarias y suficientes, debe también explicar cómo es que los usuarios están habilitados a formular razonamientos subrogantes válidos (RSV). Un RSV se produce cuando dados dos objetos distintos A y B (en donde en este contexto A es un modelo y B el sistema a estudiar) la premisa de la inferencia es una proposición acerca de A y la conclusión un proposición acerca de B. Es esta capacidad de establecer RSV lo que, de acuerdo con Contessa, sigue siendo un misterio inexplicado en Suarez. Para saldar esta cuestión es que Contessa desarrolla su concepción interpretativa en donde presenta a los RSV como síntomas de la representación y apela a las nociones de interpretación y denotación para explicar el proceso por el cual se produce el acto de la representación. En este sentido el autor afirma que un modelo es una representación epistémica de cierto sistema si y sólo si: (i) El usuario elige un vehículo para representar el sistema (denotación) y (ii) el usuario adopta una interpretación del modelo en términos

del sistema. Para el autor estas condiciones precisamente explican lo que Suárez no hacía: no sólo dan cuenta de los elementos necesarios y suficientes de la representación sino que también explican el proceso de producción de los RSV.

Hasta aquí hemos realizado un breve recorrido del modo en que ha sido tratada la noción de representación; partiendo de *concepciones naturalistas o sustantivas* que consideraban que la representación se debía, exclusivamente, a la existencia de ciertas relaciones dadas entre el modelo y el sistema de estudio, hasta llegar a *concepciones pragmáticas* que evidenciaban la necesidad de introducir el agente como parte estructural del proceso representativo. Asimismo hemos explicado que para algunos autores un elemento fundamental que se constituye como signo de la representación es la posibilidad de establecer RSV (mediante la interpretación de ciertos elementos del modelo como elementos del sistema). A continuación, analizaremos concretamente los diferentes modelos presentados sobre la EN. El objetivo será mostrar que la fuerte incompatibilidad existente entre ellos no sólo enturbia el concepto mismo de EN, sino que dado el carácter fundamental que la EN juega en el proceso de producción del conocimiento químico, cuestiona la idea misma de que los modelos generan conocimientos *porque* representan.

3.2. Modelos incompatibles de electronegatividad

Si retomamos el análisis de los diversos modelos sobre EN presentados en la segunda sección, advertiremos que los mismos presentan ciertas peculiaridades en función de las inferencias que podemos extraer de ellos. Siendo que estas inferencias son incompatibles entre sí, parecería ser entonces que la posibilidad de establecer RSV no garantiza la representación.

El análisis revela que los tres modelos suponen fuertes diferencias procedimentales, conceptuales y categoriales (Accorinti y Labarca, 2020). Respecto a las diferencias procedimentales podemos afirmar que mientras que los modelos de Mulliken y de Allred-Rochow definen EN desde un dominio espectroscópico, Pauling desarrolla su modelo sobre la base de procedimientos termoquímicos. Un hipótesis posible sería entonces evaluar si la incompatibilidad se debe precisamente a las diferentes técnicas procedimentales utilizadas (*cfr.* Accorinti, 2019; Fisher, 2017).

Sin embargo, trabajos recientes parecen desafiar esta hipótesis: los nexos entre EN y el enfoque FSGO (Floating Spherical Gaussian Orbital), un método poco conocido en

química cuántica que surgiera a fines de la década de 1960, fueron explicitados a partir del trabajo de Simons *et al.* (1976), quienes construyeron la primera escala de EN *ab initio*. Sobre la base de dicho método, fueron propuestas dos escalas empíricas de EN que emplean la polarizabilidad (Tandon, Labarca y Chakraborty, 2021) y la dureza (Kumari, *et al.* 2022). Cuando se comparan entonces los tres modelos, la única diferencia existente es procedimental.

Respecto a las diferencias conceptuales, mientras que Pauling y Allred-Rochow definen la EN en la misma dirección, como un poder de atracción de electrones, en el modelo de Mulliken, por el contrario, se la conceptualiza como la tensión existente en un átomo entre la tendencia a ganar y perder electrones. Lo que esto evidencia por el momento es la incomprensión que actualmente se tiene del significado o sentido de la EN. Como afirma Mullay *"aún en estos días no hay una repuesta definitiva a la pregunta ¿qué es la electronegatividad? ¿por qué la electronegatividad es tan útil para los químicos? y ¿por qué existe hace tanto tiempo?"* (Mullay, 1987, p.2).

Pese a ello, lo más interesante surge cuando evaluamos o intentamos pensar, a partir de los modelos dados, qué tipo de propiedad es la EN. En efecto, la propiedad que instancia la EN es una propiedad categorialmente diferente en cada uno de los modelos reseñados. Mientras que el modelo de Pauling supone que la EN es una *propiedad extrínseca*, los modelos de Mulliken y Allred-Rochow suponen que la EN se constituye como una *propiedad intrínseca*. La diferencia e importancia de nociones como 'intrínseca' y 'extrínseca' se ha discutido ampliamente en el campo de la filosofía (*cfr.* Lewis, 1983, 1986; Rae y Lewis, 1998; Sider, 1996; Vallentyne, 1997). Tal distinción aparece a través de diferentes categorías (propiedades categóricas o disposicionales o propiedades intrínsecas o relacionales) en temas relacionados con la filosofía de la identidad (Lewis, 1983, 1986), la filosofía de la ética (Moore, 1903) o la filosofía de ciencia (Kim, 1982; Mumford, 2011). Para el propósito de este trabajo, tomaremos la noción preteórica propuesta por David Lewis (1983), quien define una propiedad intrínseca como una propiedad *"que las cosas tienen en virtud de lo que son"* mientras que una propiedad extrínseca se define como una propiedad *"que las cosas tienen en virtud de sus relaciones o falta de relaciones con otras cosas"* (p.197) .

Comúnmente, las propiedades extrínsecas (o externas) e intrínsecas se entienden, respectivamente, como 'relacionales' y 'no relacionales'. No obstante, las dos clasificaciones no son estrictamente idénticas y la distinción entre ellas ha sido

ampliamente debatida (*cfr.* para mayores detalles, Marshall y Weatherson, 2018). Sin embargo, no entraremos en esta discusión aquí porque no es un punto crucial para el propósito del presente capítulo: supondremos que la clasificación de propiedades en *propiedades intrínsecas o no relacionales*, por un lado, y *propiedades extrínsecas o relacionales*, por el otro, es suficiente para advertir los diferentes e incompatibles modos en que lo modelos actuales piensan la EN.

Evaluemos entonces esta distinción en el contexto de los modelos sobre la EN presentados previamente. Si observamos el modelo de Pauling podemos inferir que tal modelo supone que la EN es una *propiedad externa o extrínseca* que no pertenece a los átomos aislados sino a la molécula como un todo. Por un lado, en Pauling los enlaces covalentes juegan un papel central. Pero por otro lado, y fundamentalmente, el análisis de la ecuación que permite calcular la EN (ver ecuación 1) muestra que dicho cálculo se realiza en función de la relación entre dos sustancias A y B. Hay que advertir, pues esto puede generar alguna confusión, que si en la escala brindada por Pauling se asigna un valor de EN a cada uno de los elementos aisladamente eso se produce sólo porque se toma, de modo convencional, al hidrógeno como valor de referencia.

Por el contrario, tanto el modelo de Mulliken como el de Allred-Rochow nos brindan una imagen muy diferente. En ambos formalismos (ver ecuaciones 2 y 3) la EN se define para cada átomo aislado en función de ciertas propiedades características de los átomos mismos. En Mulliken, la EN es una *propiedad intrínseca* de los átomos en tanto depende de la tensión para atraer o perder electrones. En efecto, en el modelo de Mulliken la EN se determina en función de dos propiedades características de los átomos: el potencial de ionización y la afinidad electrónica. Asimismo, en Allred y Rochow también la EN se constituye en función de la propiedad de los átomos de atraer electrones, medida, en este caso, a partir de la carga efectiva debida al núcleo y a los electrones que lo rodean, y del radio covalente existente entre el electrón y el núcleo de su átomo.

Resumiendo y considerando entonces las características recientemente identificadas podemos encontrar similitudes y diferencias que nos permitirán proporcionar una mejor comprensión del problema del concepto de EN. Comparando el modelo de Pauling con el modelo de Allred y Rochow, encontramos que hay una coincidencia conceptual con respecto al significado de EN pero una diferencia procedimental y categorial. Ambos, como dijimos, conciben EN en la misma dirección; sin embargo, el primero se calcula mediante técnicas termoquímicas y la considera una

propiedad extrínseca, mientras que el segundo modelo requiere técnicas espectroscópicas conceptualizándola como una propiedad intrínseca. Por el contrario, la EN de Pauling y la EN de Mulliken no tienen nada en común: no coinciden en términos procedimentales, ni categoriales, ni en términos conceptuales.

La estrategia usual para obviar estas dificultades teóricas es desestimar estas diferencias advirtiendo que, en tanto que existen correlaciones entre las escalas, los problemas aquí presentados no serían relevantes; más aún, ni siquiera serían problemas reales. Pese a ello, es importante aclarar dos cuestiones fundamentales que debilitan este modo peculiar pero recurrente que suele utilizarse para desestimar el problema.

En primer lugar, independiente a la mentada correlación lineal entre escalas, perdura el inconveniente de entender cuál es el portador al cual se le atribuye la propiedad de EN; es decir, cuál es el referente de la EN: ¿Es una propiedad atómica, por tanto, se refiere al átomo o bien es una propiedad relacional, en cuyo caso el referente lo constituiría la molécula como un todo? (*cfr.* Accorinti y Labarca, 2020; Ruthenberg y Martínez González, 2017)

En segundo lugar, siendo que una correlación entre las escalas no es una equivalencia conceptual, su análisis no puede consumar el concepto mismo. Detengámonos un momento para evaluar lo que esto implica. En primer lugar, consideremos la correlación lineal estipulada entre el modelo de Pauling y el de Mulliken:

$$\chi_P = 1{,}35[\chi_M]^{1/2} - 1{,}37$$

en donde χ_P denota a la EN de Pauling y χ_M a la EN de Mulliken. Esta correlación numérica que supone, por supuesto, una convergencia respecto de los resultados empíricos, difiere tanto en relación con la unidades de medida comparadas como a las estrategias de medición utilizadas. Mientras que en Pauling la unidad de medida es energía$^{1/2}$, en Mulliken la unidad de medida es energía. Asimismo, los dominios involucrados son diferentes: Pauling trabaja en un dominio termoquímico y Mulliken en un dominio espectroscópico o geométrico.

Algo similar sucede cuando se comparan las escalas de Pauling y Allred-Rochow:

$$\chi_P = 0{,}359\chi_{A-R} + 0{,}744$$

en donde χ_P refiere a la EN de Pauling y $\chi_{A\text{-}R}$ refiere a la EN de Allred y Rochow. En este caso, pese a que, como habíamos señalado anteriormente, ambos modelos conciben conceptualmente la EN en términos de un poder de atracción, mientras que Pauling piensa ese poder en términos de energía$^{1/2}$, Allred y Rochow la piensan como una fuerza. Nuevamente aquí la correlación lineal no implica tampoco una correlación en términos de los dominios desde el cual trabajan: el primero, como dijimos, trabaja en un dominio termoquímico y el segundo lo hace desde un dominio espectroscópico.

3.3. Posibles opciones filosóficas frente al problema

La existencia de modelos incompatibles pero empíricamente exitosos dificulta la tarea de poder traducir la información que brindan en información sobre el sistema. Ello significa que no es posible especificar cuál es el modelo correcto o cómo es el sistema que pretendemos describir. De este modo, el éxito en la aplicación de los distintos modelos no implica un mayor conocimiento de la naturaleza del fenómeno que queremos estudiar. A la luz de esta situación, pueden diseñarse diferentes estrategias de solución que presentaremos muy sucintamente a continuación.

Una alternativa plausible sería asumir un tipo de *perspectivismo* (Giere, 2006), según el cual los distintos modelos nos brindan múltiples visiones que describen diferentes aspectos del sistema. En este sentido, las diferentes perspectivas de análisis adjudicarán diferentes características y así podríamos usar diferentes modelos para hablar del mismo sistema. Considerando que aquí estamos ante modelos incompatibles la factibilidad de tal proyecto exigiría que: (a) se abandone la pretensión representacionalista; (b) se reconsideren los elementos involucrados en el proceso de representación a fin de dar cuenta de tal diversidad; o bien (c) se abandone el monismo ontológico a favor de algún tipo de pluralismo ontológico.

La primera opción supone asumir que el conocimiento científico no es esencialmente representativo sino que construye constructos téoricos útiles que sirven para establecer predicciones. Esta opción supone adoptar una perspectiva *instrumentalista* (Lombardi *et al.*, 2016; Sober, 2018) anulando el proceso inferencial que concluye posiciones realistas a partir del éxito predictivo.

La segunda opción exige una reconfiguración del proceso de representación. Dada la incompatibilidad mencionada parecería difícil traducir la existencia de los RSV como

síntomas de la capacidad representativa. Un salida posible sería afirmar que la representación no se define simplemente como "C usa S para representar T con un propósito X" (Giere, 2010). Estas categorizaciones no son suficientes ya que como vimos para el caso de la EN un agente puede usar tanto el modelo de Pauling como el modelo de Mulliken para representar el mismo sistema T con el mismo propósito X. Siendo que ambos modelos adscriben propiedades diferentes e incompatibles, el salvoconducto sería afirmar entonces que habría que completar el diagrama de la siguiente forma: "C usa S para representar T a través de la técnica experimental Z con un propósito X" (Accorinti, 2019; Fisher, 2017). La idea sería disolver la incompatibilidad afirmando que las técnicas experimentales son aspectos que condicionan la representación del fenómeno.

La tercera opción sería adoptar un *pluralismo ontológico* (Carnap 1950, Cartwright 1994, Lombardi y Pérez Ransanz 2012). Desde esta perspectiva se disolvería la incompatibilidad ya que cada fenómeno se configuraría en función del marco conceptual con el cual se lo interprete; vale decir, ni siquiera serían propiedades del mismo sistema. De esta forma sería entonces posible afirmar la existencia de entidades y/o propiedades incompatibles siempre que se lo haga desde disímiles esquemas conceptuales. Siendo así, la pregunta por lo existente sólo tiene sentido en un sentido interno (Carnap, 1950), ya que en definitiva lo que las teorías científicas describen no es la realidad trascendente sino una ontología que se constituye a partir de un proceso de síntesis entre ciertos esquemas conceptuales y la realidad. Mientras que una postura monista y reduccionista supone que sólo existe una única realidad y que ésta puede conocerse, la postura pluralista implica no solamente la negación de una realidad absoluta, sino la postulación de múltiples realidades relativas a los diferentes esquemas conceptuales (Lombardi y Pérez Ransanz, 2012).

Otra alternativa frente al problema planteado sería afirmar que, ante la multiplicidad de modelos, *solamente uno de ellos puede ser el correcto*. Desde esta perspectiva, mientras que un modelo sería el modelo 'objetivo', los otros modelos serían meros instrumentos. Si bien esta es un postura plausible, no hay criterios epistémicos para justificar tal decisión: los tres modelos presentados son empíricamente adecuados, establecen predicciones exitosas y permiten realizar inferencias sobre el sistema. En este sentido, tales motivaciones no estarían legitimadas por los criterios de corrección estándares que la ciencia (y esta particular perspectiva) utiliza para la aceptación de una

teoría, sino que emergen como consecuencia de ciertos supuestos realistas que exceden el campo de la práctica científica misma.

En esa dirección, algunos de los más renombrados especialistas en el campo de la electronegatividad adoptan una perspectiva reduccionista, según la cual la EN atómica debe expresarse en términos mecánico cuánticos. Argumentan que a la luz de las dificultades que presenta la EN en relación con una única definición, y frente a las limitaciones de la escala de Pauling para establecer valores para los elementos del grupo de los gases nobles, toda definición de EN debe ser compatible con los conceptos cuánticos elementales utilizados para describir la estructura electrónica de los átomos (configuraciones electrónicas, números cuánticos y niveles de energía) (*cfr.* Murphy, Meek, Allred y Allen, 2000).

Frente a este enfoque, y sobre la base de un estudio de los modelos de Pauling y Mulliken, Lombardi y Martínez González (2019) argumentan con algunas notas acerca de métodos de cuantificación vigentes desde una perspectiva anti-reduccionista. En particular, los autores desarrollan los siguientes argumentos: (i) las descripciones formales de las electronegatividades de Pauling y Mulliken están basadas en los modelos orbitales de enlace, y estos modelos se construyen gracias a una aproximación incompatible con la mecánica cuántica, donde reside la clasicidad de la química cuántica; y (ii) la electronegatividad en química cuántica no es derivable de las leyes de la mecánica cuántica, sino que requiere supuestos como los provenientes de la teoría estructural química de Lewis.

4. Conclusiones

En este capítulo hemos analizado tres modelos clásicos de electronegatividad que suelen utilizarse habitualmente en la práctica química, mostrando las fuertes diferencias conceptuales existentes entre ellos, así como la problemática vinculada al carácter representativo de modelos empíricamente exitosos pero incompatibles entre sí. Asimismo, hemos analizado distintas alternativas de solución frente al problema planteado. Dado que la reflexión filosófica sobre este tópico es muy reciente, es de esperar que investigaciones posteriores arrojen luz sobre una noción central y, a su vez, profundamente compleja del mundo químico.

Referencias bibliográficas

Accorinti, H. (2019). "Incompatible models in chemistry: the case of electronegativity". *Foundations of Chemistry* 21: 71–81.

Accorinti, H. y Labarca, M. (2020). "Commentary on the models of electronegativity", *Journal of Chemical Education* 97: 3474–3477.

Allen, L. C. y Huheey, J. E. (1980). "The definition of electronegativity and the chemistry of noble gases". *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* 42: 1523–1524.

Allred, A. L. (1961). "Electronegativity values from thermochemical data". *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* 17: 215–221.

Allred, A. L. y Rochow, E. G. (1958). "A scale of electronegativity based on electrostatic force". *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* 5: 264–268.

Batsanov, S. S. y Batsanov, A. S. (2012). *Introduction to Structural Chemistry*, Springer: Dordrecht. Bergmann, D. y Hinze, J. (1996). "Electronegativity and molecular properties". *Angewandte Chemie International Edition in English* 35: 150–163.

Callender C. y Cohen J. (2006). "There is no special problem about scientific representation". *Theoria* 55: 67–81.

Carnap, R. (1950). "Empiricism, Semantics, and Ontology". *Revue Internationale de Philosophie* 4: 20-40. [Reimpreso en el suplemento a *Meaning and Necessity: A Study in Semantics and Modal Logic.* University of Chicago Press: Chicago, 1956]

Cartwright, N. (1994). "The metaphysics of the disunified world". *Proceedings of the Biennial Meeting of the Philosophy of Science Association* 2: 357–364.

Cherkasov, A. R.; Galkin, V. I.; Zueva, E. M. y Cherkasov, R. A. (1998). "The concept of electronegativity. The current state of the problem". *Russian Chemical Reviews* 67: 375–392.

Contessa, G. (2006). "Scientific models, partial structures and the new received view of theories". *Studies in History and Philosophy of Science* 37: 370–377.

Contessa, G. (2007). *Representing reality: The ontology of scientific models and their representational function*. London: London School of Economics.

da Costa, N. y French, S. (2000). "Models, theories and structures: Thirty years on". *Philosophy of Science* 67: 116–127.

Fisher, G. (2017). "Content, design, and representation in chemistry". *Foundations of Chemistry* 19: 17–28.

French, S. (2003). "A model-theoretic account of representation (Or, I don't know much about art… but I know it involves isomorphism)". *Philosophy of Science* 70: 1472–1483.

French, S. (2013). "The structure of theories". En: M. Curd y S. Psillos (eds.). *The Routledge Companion to Philosophy of Science*. London: Routledge, pp. 301–312.

Frigg, R. (2002). "Models and representation: why structures are not enough." *Measurement in Physics and Economics Project Discussion Paper Series.* DP MEAS 25/02. London School of Economics.

Frigg, R. (2006). "Scientific representation and the semantic view of theories". *Theoria.* 55: 46–65.

Frigg, R. y Hartmann, S. (2006). "Models in science". *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2020 Edition), E. N. Zalta (ed.), <https://plato.stanford.edu/archives/spr2020/entries/models-science/>.

Fung, B-M. (1965). "The electronegativity of noble gases". *The Journal of Physical Chemistry* 69: 596–600.

Giere, R. (2004). "How models are used to represent physical reality." *Philosophy of Science* 71: 742–752.

Giere, R. (2006). *Scientific Perspectivism,* Chicago: The University of Chicago Press.

Giere, R. (2010). "An agent-based conception of models and scientific representation". *Synthese* 172: 269–281.

Gordy, W. (1946). "A new method of determining electronegativity from other atomic properties". *Physical Review* 69: 604–607.

Jensen, W. (1996). "Electronegativity from Avogadro to Pauling. Part I: Origins of the concept of electronegativity". *Journal of Chemical Education* 73: 11−20.

Jensen, W. (2012). "The quantification of electronegativity: some precursors". *Journal of Chemical Education* 89: 94–96.

Kim, J. (1982). "Psychophysical supervenience". *Philosophical Studies* 41: 51–70.

Kumari, V.; Singh, T.; Devi, S.; Tandon, H.; Labarca, M. y Chakraborty, T. (2022). "Atomic electronegativity based on hardness and Floating Spherical Gaussian Orbital approach". *Journal of Mathematical Chemistry* 60: 360–372.

Lewis, D. (1983). "Extrinsic properties". *Philosophical Studies* 44: 197–200. Lewis D. (1986). *On the plurality of worlds*. Oxford: Blackwell.

Lombardi, O. y Martínez González, J. C. (2019). Aproximaciones, clasicidad y electronegatividades: la reducción vía química cuántica, En: Vergne, R. (ed.), *El Orden de los Elementos. El Sistema Periódico de los Elementos y sus Problemas*, Mendoza: Universidad Nacional de Cuyo, pp. 69-101.
Lombardi, O. y Pérez Ransanz, A. R. (2012). *Los Múltiples mundos de la ciencia. Un realismo pluralista y su aplicación a la filosofía de la física.* México: UNAM-Siglo XXI.
Lombardi, O.; Accorinti, H. y Martínez González, J. C. (2016). "Modelos científicos: el problema de la representación". *Scientiae Studia* 14: 151–174.
Marshall, D. y Weatherson, B. (2018). "Intrinsic vs. extrinsic properties". *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2018 Edition), En E. N. Zalta (ed.), <https://plato.stanford.edu/archives/spr2018/entries/intrinsic-extrinsic/>.
Meek, T. (1995). "Electronegativities of noble gases". *Journal of Chemical Education* 72: 17–18.
Moore, G. E. (1903). *Principia ethica*. Cambridge: Cambridge University Press.
Morgan, M y Morrison, M. (1999). *Models as mediators*. Cambridge: Cambridge University Press.
Morrison, M. (2011). "One phenomenon, many models: Inconsistency and complementarity". *Studies in History and Philosophy of Science* 42: 342–351.
Mullay, J. (1987). "Estimation of atomic and group electronegativities". *Structure and Bonding* 66: 1–25.
Mulliken, R. (1934). "A new electronaffinity scale; together with data on valence states and on valence ionization potentials and electron affinities". *Journal of Chemical Physics* 2: 782–793.
Mumford, S. (2011). *Getting causes from power*. Oxford: University Press.
Murphy, L.; Meek, T.; Allred, A. y Allen, L. (2000). "Evaluation and test of Pauling's electronegativity scale". *Journal of Physical Chemistry A* 104: 5867–5871.
Pauling, L. (1932). The nature of the chemical bond. IV. The energy of single bonds and the relative electronegativity of atoms. *Journal of American Chemical Society* 54: 3570–3582.
Pauling, L. (1950). *College Chemistry: An Introductory Textbook of General Chemistry*, 2nd ed. San Francisco: W. H. Freeman & Company.
Pauling, L. y Yost, D. M. (1932). "The additivity of the energies of normal covalente bonds". *Proceedings of the National Academy of Sciences* 18: 414–416.
Politzer, P. y Murray, J. S. (2018). Electronegativity—a perspective. *Journal of Molecular Modeling* 24: 214−222.
Pritchard, H. O. y Skinner, H. A. (1955). "The concept of electronegativity". *Chemical Reviews* 55: 745–786.
Rae, L. y Lewis, D. (1998). "Defining 'intrinsic'". *Philosophy and Phenomenological Research* 58: 333–345.
Ruthenberg, K y Martínez González, J. C. (2017). "Electronegativity and its multiple faces: persistence and measurement". *Foundations of Chemistry* 19: 61–75.
Salas-Bannuet, G.; Ramírez-Vieyra, J. y Noguez-Amaya, M. E. (2011). "La incomprendida electronegatividad (trilogía). II. Evolución en la cuantificación de la electronegatividad". *Educación Química* 22: 155–161.
Sider, T. (1996). "Intrinsic properties". *Philosophical Studies* 83: 1–27.
Sober, E. (2018). "Instrumentalism revisited". *Crítica. Revista Hispanoamerica de Filosofía* 31: 3–39.
Stegmuller, W. (1979). *The structuralist view of theories.* New York: Springer.
Suárez, M. (2003). "Scientific representation: against similarity and isomorphism". *International Studies in the Philosophy of Science* 17: 225–244.
Suárez, M. (2004). "An inferential conception of scientific representation". *Philosophy of Science* 71: 767–779.
Suppe, F. (1989). *The semantic conception of theories and scientific realism*. Urbana: University of Illinois Press.
Tandon, H.; Labarca, M. y Chakraborty, T. (2021). "A scale of atomic electronegativity based on Floating Spherical Gaussian Orbital Approach", *ChemistrySelect – Chemistry Europe* 6: 5622–5627.
van Fraassen, B. C. (1989). *Laws and symmetry*. Oxford: Clarendon Press.
Vallentyne, P. (1997). "Intrinsic properties defined". *Philosophical Studies* 88: 209–219.

CAPÍTULO 9

El problema de las leyes químicas

Hernán Accorinti
CONICET – Universidad de Buenos Aires

1. Introducción

En este capítulo abordaremos un problema recurrente en el ámbito de la filosofía general de la ciencia pero que cobra singular relevancia en el contexto de la química: el problema en torno a las leyes científicas. La idea del presente capítulo es acercar al químico a uno de los principales problemas filosóficos del siglo XX y evaluar si las peculiaridades de la química pueden enriquecer la discusión respecto al modo en que se abordó el problema de las leyes científicas en filosofía.

Esta temática ha sido ampliamente discutida durante el siglo XX pero siempre tomando como patrón de referencia a las leyes de la física. Desde un análisis centrado en la física, la universalidad, la verdad y la necesidad se impusieron como criterios para evaluar la legalidad de los enunciados científicos. Desde esta perspectiva, la química no ha corrido con la misma suerte que la física: a pesar que existen leyes químicas como la ley de Proust, la ley de Dalton o la ley periódica, el estatus de legalidad de tales enunciados ha sido históricamente cuestionado. El principal inconveniente, cuya naturaleza en este capítulo trataremos de elucidar, es que las leyes de la química no son universales; es más, en la práctica ellas son enunciadas junto con un sinnúmero de excepciones. Dado que hay excepciones podríamos afirmar que aquello que aseveran las leyes no es ni universalmente verdadero ni necesario. Pero si es así ¿son auténticas leyes científicas?, y de serlo ¿cuál es la razón de tal legalidad?

Resulta conveniente destacar, para así poder encuadrar y entender el problema aquí planteado en el marco de las discusiones filosóficas tradicionales, que el problema en torno a las leyes no es independiente de los otros problemas filosóficos abordados en el presente libro. Por ejemplo, posturas conducentes al reduccionismo de la química a la física tenderán a pensar que no hay leyes auténticas en química ya que éstas pueden o deben reducirse a las leyes físicas. Desde esta perspectiva, las excepciones en la química

serían un indicio de la falta de poder explicativo de las mismas. Por el contrario, una postura no reduccionista como la pluralista tenderá a reivindicar la legitimidad y autonomía de las leyes químicas. Demostrar entonces las existencia o no de las leyes químicas puede ser un buen argumento para defender alguna de las posturas mencionadas.

Otra relación posible se da entre la noción de ley y la de clase natural. En efecto algunos autores en el contexto de la discusión respecto a qué son las leyes naturales aseveran que las mismas hay que pensarlas en relación a las clases naturales (Bigelow, Ellis y Lierse, 1992). En este sentido, el problema de las leyes adviene como un sub-tema respecto al problema de las clases naturales (para mayores detalles, véase el Capítulo 7 de este libro).

2. El problema de las leyes en filosofía

Comencemos presentando el problema y los criterios filosóficos tradicionalmente estipulados para la noción de ley. Lamentablemente desde los inicios la discusión se empantana debido a la ausencia de un criterio común que nos permita entender qué es o a qué refiere una ley científica. Si adoptamos la máxima *quineana* 'sin identidad no hay entidad', el problema fenece antes de nacer ya que lo que la literatura muestra es una diversidad de opiniones contrapuestas. La noción misma de ley se entiende como regularidades verdaderas (Reichenbach, 1953), como regularidades verdaderas nómicamente necesarias (Hempel y Oppenheim, 1948), como una relación de *necesitación*[6] entre los universales (Armstrong, 1983), como axiomas o teoremas de un sistema (Lewis, 1973), como reglas de inferencia (Giere, 1988) o como máquinas nomológicas (Cartwright, 1983).

De todos modos, aun cuando no se hayan encontrado condiciones suficientes y necesarias, sí se han desarrollado ciertas perspectivas que nos permiten comprender lo que la noción de ley implica. Una de las primeras corrientes fue 'la concepción enunciativa' (Chisholm, 1946; Goodman, 1947; Hempel y Oppenheim, 1948) según la cual las leyes son enunciados que cumplen con ciertas características. Según esta

[6] En inglés '*necessitation'*. Como veremos, Armstrong utiliza este término para referir una relación de necesidad entre universales; en donde el término "necesidad" en el contexto de una ley tiene que interpretarse como "un universal *necesita* otro universal".

concepción entre el conjunto de los enunciados solo serán leyes aquellas que sean: i- universales; ii- verdaderos; iii- lógicamente contingente y iv- nómicamente necesarios.

Las primeras dos condiciones no resultan extrañas: de una ley se espera que se cumpla, es decir, que sea verdadera y que se cumpla para todos los casos. La tercera condición supone simplemente que la ley es empírica, es decir contingente. En este sentido la necesidad involucrada en la noción de ley no es una necesidad lógica.

Es la cuarta condición la madre de todas las batallas ya que en ella radica la razón de ser de todas las controversias. De hecho, producto de las diferentes interpretaciones que se hicieron de ella, se desarrollaron como veremos dos grandes tradiciones filosóficas con visiones contrapuestas: la tradición regularista y la tradición necesitarista. La última condición apela a la noción de necesidad con el fin de diferenciar leyes y generalizaciones accidentales. El problema emerge porque resulta racional pensar que pueden existir dos tipos de regularidades: las regularidades que se producen como consecuencias de la existencia de una ley y la regularidades que se producen accidentalmente por el mero hecho de que no existe una excepción. Precisamente el carácter nómico de las leyes le atribuye a éstas una fuerza modal distintiva (para un análisis del relación entre realismo modal y nomológico, ver Borge 2016). En efecto, el modo (de ahí la noción de fuerza modal) en que es verdadera una generalización accidental difiere respecto al modo en que es verdadera una ley. Una generalización accidental es un enunciado universal verdadero cuya universalidad no es necesaria ya que su negación es posible. En cambio, una ley científica es de hecho necesariamente verdadera. En este sentido se suele decir que una ley científica describe eventos que si bien son lógicamente contingentes son físicamente necesarios (para una análisis más detallado aunque introductorio ver Díez y Moulines, 1997). Pensemos, para entender esta caracterización, los siguientes ejemplos presentados por van Fraassen (1989) en su clásico libro *Laws and Symmetry*:

a) 'Todas las esferas de oro tienen menos de 1 km de radio'

b) 'Todas las esferas de uranio tienen menos de 1 km de radio'

Como puede advertirse ambos enunciados tienen la misma forma lógica ya que son enunciados universales, ambos también son verdaderos y obviamente ambos son lógicamente contingentes. Sin embargo, son verdaderos de un *modo* diferente: mientras que el primero es verdadero pero no *necesariamente* verdadero ya que es posible que exista una esfera de oro de más de 1 km de radio; el segundo es necesario ya que según

las leyes de la física una esfera de uranio superior a un km de radio sería sumamente inestable, es decir, explotaría. Evidentemente así presentada la distinción implica circularidad: se plantea que la noción de ley supone necesidad nómica pero se identifica tal necesidad por el hecho de violar o no alguna ley científica. Sin embargo la circularidad que el caso presenta no vuelve inútil el planteo realizado pues si bien el mismo no nos sirve para identificar qué enunciado general es ley, sí nos sirve para entender que el concepto de ley involucraría, a diferencia de las regularidades accidentales, algún tipo de necesidad.

Ahora bien, dada la equivalencia empírica existente entre leyes y generalizaciones accidentales surgieron dos grandes líneas de investigación que afrontaron el problema en cuestión de un modo absolutamente divergente: una de tipo lógico-sintáctica y otra con fuertes connotaciones metafísicas. A continuación explicaremos sucintamente algunos de lo puntos fundamentales con los fines de que ello sirva para evaluar posteriormente su relevancia en relación a las leyes químicas.

La primera línea de investigación estuvo abocada a tratar de brindar criterios que permitan diferenciar enunciados que refieren a leyes de enunciados que refieren a meras regularidades. Uno de los primeros criterios estipulados por Hempel y Oppenheim (1948) y Nagel (1968) fue considerar que las leyes son generalizaciones irrestrictas que no hacen referencia a objetos particulares ni tienen referencia espacio-temporal. Sin embargo este criterio no parece adecuado si uno considera que las leyes de Kepler refieren a objetos específicos. Decir que este tipo de leyes son leyes derivadas de otras más fundamentales como las de Newton no resuelve el problema: en primer lugar eso supondría que solo las leyes fundamentales son propiamente leyes, y en segundo lugar contradice el proceso histórico ya que las leyes de Kepler fueron admitidas y sumadas al corpus teórico previamente a la existencia de la teoría newtoniana. A su vez algunos afirman que es concebible pensar en leyes que versen sobre particulares tan específicos como el jardín de un individuo cualquiera (ver Sober, 1988; Tooley, 1977).

Dentro de esta línea lógico-sintáctica que intenta brindar criterios para diferenciar ambos tipo de enunciados Goodman (1947) propuso en primera instancia, como segundo criterio distintivo, que una ley al no ser una verdad universal *casual* tiene la particularidad de poder ser confirmada por sus instancias particulares. Sin embargo, años después el mismo Goodman (1979) encuentra problemas con este criterio al mostrar la dificultad

para saber cuándo una propiedad es *proyectable* a futuro y cuándo no[7]. Asimismo van Fraassen (1985) advierte que el criterio confirmacionista tampoco es adecuado dado que si los casos positivos confirman los enunciados legaliformes lo hacen solo trivialmente .

La capacidad de las leyes para soportar contrafácticos, establecer predicciones o brindar explicaciones fueron otros de los infructíferos criterios que han sido puestos en consideración. Como consecuencia de la crítica de todos y cada uno de ellos[8], actualmente se ha abandonado la expectativa de poder establecer de un modo claro una diferenciación en términos lógico-sintáctico entre regularidades nómicas y regularidades accidentales.

La segunda línea de investigación es, en parte, una consecuencia de este fracaso. La imposibilidad de establecer una diferencia clara entre enunciados universales casuales y enunciados universales legales ha motivado a pensar si aquello que estipulan las leyes científicas es objetivamente necesario, producto de un milagro divino o simplemente una mera coincidencia. En algún sentido la pregunta que surge como consecuencia de tal fracaso es: ¿son las leyes algo más que generalizaciones accidentales?; y en el caso que lo fueran ¿qué son? En este sentido esta segunda línea, de carácter netamente metafísica, se pregunta por la existencia misma de algún tipo de sustrato objetivo que subyazga detrás de las regularidades existentes en el mundo, de modo tal de poder otorgarle a las leyes científicas algún tipo de necesidad física. Surgen en este contexto dos grandes posiciones antagónicas que interpretarán de un modo metafísicamente contrapuesto la idea misma de ley natural: el regularismo y el necesitarismo.

2.1. Regularismo vs. Necesitarismo

[7] Lo que advierte Goodman (1979) es que sólo ciertas propiedades estamos dispuestos a generalizar, es decir, a proyectar hacia el futuro. Introduce como ejemplo el término "verdul", propiedad que refiere a las esmeraldas que han sido examinadas antes del tiempo t y son verdes o no se han observado antes del tiempo t y son azules. La cuestión es que las esmeraldas verdes que han sido observadas hasta ahora me permite inferir tanto que las esmeraldas son verdes como que son verdules. Sin embargo si una esmeralda es verdul entonces será azul y no verde. La paradoja es que ambas hipótesis están igualmente confirmadas.

[8] En términos generales se ha advertido que estos últimos tres criterios suponen algún tipo de circularidad (*cfr.* Tooley 1977, van Fraasen 1985). En términos particulares, el problema de los contrafácticos es que no tienen condiciones de verdad claros pues precisamente se refieren a hechos que no sucedieron, es decir, a condicionales cuyos antecedentes no se han cumplido ni se cumplirán por definición; para el caso del criterio explicativo Cartwright (1980) encuentran ejemplos de explicación sin ley y de leyes que no son explicativas. A su vez la noción de predicción requiere para que cumpla su función una clarificación entre aquellas predicciones que son relevantes (sobre casos desconocidos) y aquellas que se obtienen trivialmente (como producto de pertenecer a una clase).

Antes de explicar las principales diferencias conviene aclarar algunos aspectos. En primero lugar, al introducirnos en la disputa conceptual entre los regularistas y los necesitaristas nos desplazamos de un concepto a otro que en la literatura no siempre ha sido suficientemente diferenciado: pasamos de la pregunta de por qué un enunciado es una *ley científica* a la pregunta en torno a lo que involucra una *ley natural*. Evidentemente ambas preguntas están interrelacionadas pues para muchos las leyes científicas pretende describir leyes naturales. En segundo lugar, siendo que este es un libro introductorio presentaremos solamente dos propuestas antagónicas. Sin embargo existen un matiz de propuestas intermedias. Dentro del regularismo, además de la postura humeana antirrealista que presentaremos a continuación, existen posturas regularistas realistas de tinte humeano como la de Lewis (1973) que intentan brindar, mediante la distinción entre propiedades naturales y no naturales y mediante una ontología de eventos discretos y asilados, constreñimientos externos que justifiquen de un modo no epistémico la diferencia entre leyes y regularidades accidentales, afirmando que las leyes describen las cosas mismas y sus propiedades.

Por el otro lado, dentro de las posturas necesitaristas existe también un división interna en función de si las leyes son internas o externas a sus instancias particulares (*cfr.* Mumford 2004). Mientras Ellis *et al.* (Bigelow *et al.*, 1992; Ellis, 2001, 2010) consideran que las leyes naturales establecen relaciones de *necesitación* que se dan en las cosas mismas ya que simplemente reflejan las propiedades esenciales de las clases naturales; Dretske (1977) , Tooley (1977) y Armstrong (1983), como veremos, consideran que las leyes naturales son externas a las instancias particulares ya que suponen una relación de *necesitación* entre los universales. A su vez desde una tercera postura que es realista, antihumeana, no esencialista ni platonista como la de Swoyer (1982) se plantea que las leyes naturales no son más que el producto de las propiedades disposicionales de los particulares (*cfr.* Bird, 2007). Por último también existen posturas que, identificando las dificultades de cada una de estas posiciones, apelan a un realismo sin leyes en donde son directamente las propiedades de las cosas las que tienen poderes causales reales, constituyéndose éstas, y no las leyes, como fundamento de necesidad del mundo (Mumford, 2004) (ver también Giere, 1999).

Comencemos presentando la primera postura conocida como regularista precisamente por considerar que las leyes no son más que regularidades verdaderas. Esta postura tiene como padre fundador a Hume y deviene de la crítica empirista que el autor

realiza a la noción misma de conexión necesaria involucrada en los casos de relaciones causales. Como es sabido Hume plantea que la relación de causalidad supone la noción de conexión necesaria entre dos eventos; es decir, si uno afirma que A causa B entonces el acaecimiento de B supone necesariamente a A. Sin embargo, desde una concepción empirista como la que defiende Hume no habría elementos empíricos para identificar tal conexión necesaria ya que si uno se constriñe estrictamente a lo que adviene de la experiencia lo único que puede observar es la contigüidad entre dos eventos, es decir la mera sucesión de un evento B que se da siempre después de A. La presunta conexión necesaria y la noción misma de casualidad que se sustenta en ella son relaciones empíricamente incontrastables. A partir de esta presentación Hume concluye que la noción de causalidad es una proyección psicológica del sujeto cognoscente que surge como producto de la constante sucesión entre dos eventos. En este sentido, adoptando una postura antirrealista al afirmar que no hay necesidades en la naturaleza[9], la postura regularista de índole humeana afirma que una ley es una regularidad verdadera que se da de hecho. Por lo tanto, lo que hace verdadero a un enunciado como 'Todos los A son B' no es más que el hecho de que todas las instancias particulares de A sean B. Una ley natural sería entonces una mera sucesión o conjunción constante de instancias particulares que producto del hábito y la costumbre proyectamos con carácter de necesidad hacia el futuro. En este sentido el carácter de necesidad prescripto en la cuarta condición anteriormente mencionada sigue vigente: la diferencia es que esa necesidad no esta en el mundo, esta en el sujeto que lo proyecta como tal. En palabras de Reichenbach (1953) una ley atiende a una relación de la forma *si-entonces* con el agregado de que la relación se mantiene siempre. Suponer, afirma el autor, un resorte oculto que relacione forzosamente lo eventos es antropomorfismo; una ley no es más que repetición constante sin excepciones.

Desde esta perspectiva de análisis para diferenciar enunciados como 'Todos los cuerpos se caen por la fuerza gravitatoria' y 'Todas las piezas de ajedrez son blancas o negras' no es necesario recurrir a criterios ontológicos empíricamente incontrastables sino a criterios epistémicos: ambos enunciados refieren a regularidades universales que acontecen de hecho; la única diferencia radica en que mientras la primera forma parte de

---

[9] Estamos aquí adoptando la lectura clásica de Hume. Existe una nueva interpretación promulgada por Strawson (1989) y Wright (1983) que entiende a Hume como un realista escéptico. Según esta perspectiva Hume no estaría afirmando que no existen conexiones necesarias en la naturaleza sino que no las podemos conocer.

nuestro corpus científico y la comunidad científica la usa con fines predictivos o explicativos, la segunda no (*cfr.* Diez y Moulines, 1997; Lange, 1993)

En esta tradición de análisis se inscribe la definición de ley de Ramsey-Lewis. Para estos autores *"una generalización contingente es una ley de la naturaleza si y sólo si aparece como teorema (o axioma) en cada uno de los sistemas deductivos verdaderos que logran la mejor combinación de simplicidad y fuerza"* (Lewis, 1973, p.73). Siendo así no toda verdad universal es ley sino sólo aquella que forma parte del mejor sistema científico. Desde esta concepción las leyes no tienen un papel rector ya que no gobiernan el comportamiento de los fenómenos particulares; simplemente describen un estado de cosas que se dan de hecho en el mundo y que cumplen cierta función para la producción del conocimiento científico.

La otra postura canónica defendida por autores como Armstrong (1983), Dretske, (1977) y Tooley (1977) le atribuye a las leyes un carácter óntico y metafísico mucho más robusto. Adoptando un fuerte realismo nomológico la *concepción necesitarista* considera que las leyes científicas no son meras descripciones de regularidades contingentes sino que describen las leyes naturales que en efecto gobiernan el comportamiento de los objetos particulares. Esta perspectiva es una de las primeras que cuestiona fuertemente la concepción enunciativa de las leyes previamente descripta. Las leyes no son enunciados verdaderos que describen una mera generalización sino, como veremos, *son relaciones* de necesitación entre los universales.

Es relevante considerar que si bien las posturas de tinte fuertemente metafísicas como la que estamos exponiendo son, por definición, empíricamente indemostrables tienen su razón de ser. Por un lado como señala Beebe (2000) esta postura satisface ciertas intuiciones: logra diferenciar leyes de meras generalizaciones, soporta contrafácticos y elimina la desconsoladora contingencia al vincular nuevamente las nociones de necesidad y legalidad. Pero por otro lado, tiene su razón de ser si uno quiere evitar posturas de tipo convencionalistas como las precedentemente mencionadas. De querer afirmar que las leyes científicas no son meros enunciados verdaderos aceptados por la comunidad científica, sino que describen y explican la razón del comportamientos de los objetos particulares, entonces uno debería adoptar algún tipo de realismo respecto a las leyes de modo tal de poder diferenciar leyes naturales de generalizaciones accidentales.

Precisamente la postura necesitarista es una apuesta, aunque no la única[10], en este sentido. Para estos autores un enunciado como 'Todos los A son B' es ley no por el mero hecho de que en sus instancias positivas conviven siempre A con B, sino porque existe una relación de necesitación entre el universal A y el universal B. Es decir, mientras que una generalización refiere a una regularidad de hecho, a una mera relación entre particulares que se da casualmente siempre, una ley natural refiere a una relación entre universales que debe darse necesariamente.

Obviamente que el regularista afirmaría que esta relación de necesitación es empíricamente incontrastable ya que lo único que podemos observar es la regularidad fáctica, es decir, solo podemos advertir que todos los A son B. En este sentido, la economía ontológica que supone la perspectiva regularista pareciera más atractiva a los tiempos que corren porque no apela a relaciones entre universales. Sin embargo nada es gratuito: un posible costo es tener que adoptar una concepción convencionalista de las leyes.

En este sentido, para concluir con esta primera aproximación al problema sobre las leyes en el contexto de la filosofía general uno podría presentar esquemáticamente la disputa mediante el siguiente dilema: o bien uno se inclina a favor de una postura ontológicamente austera a riesgo de deflacionar la noción de ley a convenciones no arbitrarias entre los científicos, o bien, en el caso que uno quiera erradicar el convencionalismo como motor central de la actividad científica, uno debería robustecer la ontología ya sea mediante la postulación de relaciones entre universales o mediante una metafísica disposicionalista.

3. El problema de las leyes en química

En este apartado contextualizaremos las discusión presentada previamente en el contexto de la química. Veremos que el análisis de esta disciplina no sólo cuestiona las específicas problemáticas generadas en el contexto de la filosofía sino que fundamentalmente abre el campo hacia nuevas indagaciones que nos permitirán entender de un modo diferente y más adecuado la noción de ley científica. Para ello evaluaremos las particularidades de

[10] Como dijimos Lewis es un regularista que intenta anclar la objetividad de las leyes en las propiedades naturales. De todos modos el intento de compatibilizar regularismo con objetivad a partir de propiedades naturales fue sujeto a severas críticas (ver un compendio en Pérez, 1996).

las leyes químicas y haremos un breve repaso por las diferentes posturas adoptadas en el ámbito de la filosofía de la química.

La primera y más inmediata pregunta que uno puede hacerse en el contexto de la filosofía de la química es si en efecto existen auténticas leyes en esta disciplina. Quizás para un químico la pregunta pueda parecer extemporánea y la respuesta evidente. Es suficiente con saber un poco de química para advertir la existencia de innumerables ejemplos de ley. Podríamos hablar, por ejemplo, de la ley periódica que establece la periodicidad de las propiedades físico-químicas de los elementos en función de su número atómico; de la ley de Dalton que afirma que cuando dos elementos de un compuesto se combinan, dada la cantidad fija de uno de ellos, la proporción en que el otro se combina para formar el compuesto están en relación a números enteros sencillos; o de la ley de proporciones definidas de Proust según la cual cualquier compuesto químico puro esta formado por sus elementos constituyentes en una proporción de masa definida e invariante. Sin embargo si uno considera la discusión previamente establecida en el contexto filosófico en donde se presentaron una serie de intuiciones respecto a los criterios para evaluar la legalidad de los enunciados pueden observarse dos cuestiones problemáticas.

En primer problema podría plantearse del siguiente modo: ¿son las identificaciones teóricas como ‘El agua es H_2O’ o ‘$Na^+ + Cl^- = NaCl$’ leyes científicas? ¿Son lo que llamamos leyes químicas meras definiciones? Si pensamos desde la concepción enunciativa descripta anteriormente, en tanto enunciados universales verdaderos fácticamente necesarios serían leyes. Sin embargo, ellas no suelen ser denominadas como tales en la mayoría de los libros de texto. Armstrong justifica esta postura afirmando que tales enunciados no vinculan universales diferentes, es decir, propiedades distintas que puedan relacionarse. Estos enunciados simplemente nos dicen que el agua y H_2O son la misma propiedad. Según Armstrong son descripciones verdades sobre el agua, sobre el H_2O o sobre el cloruro de sodio; son descripciones de elementos fundamentales pero no principios que gobiernan las interacciones (cfr. Amstrong, 1983). Sin embargo, este es un punto discutible. Ellis (2001), que defiende como dijimos la idea de que las leyes naturales se definen en función a las clases naturales, argumenta que, debido a que estas son necesidades metafísicas en la naturaleza, sí deben ser consideradas leyes naturales. Por otro lado, Mumford se pregunta en franca oposición a la teoría necesitarista de Armstrong: *“si el agua es H_2O es una verdad sobre el agua, no sobre una*

ley, y los electrones tienen espín es una verdad sobre los electrones, no sobre una ley, ¿no deberíamos decir que F tiene una relación de necesitación con G es una verdad sobre el universal F en lugar de una verdad sobre una ley?" (Mumford, 2004, p.133). Lo cierto que estas preguntas abiertas no parecen ser exclusivas de la química: expresiones como 'todos los electrones tienen carga negativa y spin ½' ¿son leyes o verdades sobre los electrones?

Existe, sin embargo, un segundo problema que surge específicamente en el contexto de la química y merece mayor atención. A este problema nos abocaremos en lo que sigue.

El particular inconveniente de las leyes químicas es que ellas presentan un cantidad no relevante de excepciones. Lo inquietante y perturbador del tema en cuestión es que, además de derrumbar de un plumazo tanto la concepción regularista (ya que no son universales) como la concepción necesitarista (ya que la relación no es necesaria), hace que las leyes sean irrefutables: si hay casos que violan la ley o muestran que la ley no se cumple y a pesar de ello la misma se mantiene, entonces ¿qué podría falsearla? Nosotros en este trabajo evaluaremos particularmente la ley de Proust. Sin embargo todas las leyes mencionadas presentan dificultades. La ley periódica tiene en la actualidad inconvenientes para ubicar los elementos hidrógeno y helio (*cfr.* Labarca y Srivaths, 2016; Labarca y Martínez González, 2019). Por otro lado, la ley de Dalton ni siquiera tiene una formulación precisa (ver Christie, 1994; Christie y Christie, 2003; Duhem, 1954).

En particular la ley de Proust estipula proporcionas constantes entre los elementos de un compuesto de modo tal que, por ejemplo, para toda muestra de agua pura, el oxigeno constituye el 8/9 mientras que el hidrógeno 1/9. Sin embargo esta ley no se aplica estrictamente en los bertólidos no estequiométricos ya que las masas no presentan proporciones definidas. En este sentido la fórmula de la Wustita, por ejemplo, se expresa como Wustita Fe1-xO, donde x muestra el grado de desviación.

Para dar cuenta de estas peculiaridades se desarrollaron diferentes propuestas. La pregunta nodal que enmarca las perspectivas que a continuación presentaremos es la siguiente: dada las excepciones existentes ¿debemos seguir pensando que son auténticas leyes científicas? Y en el caso que la respuesta sea afirmativa ¿cuál es el criterio que estaríamos adoptando para determinar la legalidad de tales enunciados? Y consecuentemente, ¿debemos adoptar un mismo concepto de ley que se aplique a todas

las disciplinas o pueden pensarse diferentes conceptos que sean específicos a las disciplinas?

3.1. Eliminando las leyes de la química

Esta estrategia se basa en afirmar que, dado lo antedicho, las leyes químicas no se constituyen como autenticas leyes científicas. Ahora bien, esta estrategia puede abordarse desde dos modos diferentes. Un reduccionista afirmaría que no son auténticas leyes ya que éstas pueden reducirse y explicarse por las leyes de la física (para mayores detalles, véase el Capítulo 4 de este libro). Desde esta perspectiva Dirac plantea que las *"leyes físicas fundamentales necesarias para la teoría matemática de gran parte de la física y la totalidad de la química son completamente conocidas desde la mecánica cuántica"* (Dirac, 1929, p.714). Para una mirada reduccionista las leyes de la química, aunque útiles para los intereses particulares de la investigación, no son más que un modo de hablar inadecuado o figurado ya que no refieren a lo real.

Pero a su vez, uno puede optar por desentenderse del concepto de ley química sin que ello implique adoptar un mirada negativa o peyorativa hacia las mismas. Schummer (2014), por ejemplo, propone una suerte de eliminativismo no reduccionista que no supone arrojar a la ciencia química a los anaqueles de segunda categorías. Afirma que en realidad es la propia noción de ley un concepto vetusto y en desuso, más cercano al siglo XIX que a la actualidad, ya que supone una metafísica universalista no compatible con disciplinas hiper-experimentales como la química. Imponer y usar tal noción en el ámbito de la química esconde una concepción reduccionista y universalista. Su propuesta es reemplazar el concepto de ley por el concepto de modelo. Para el autor la química es una disciplina que se desarrolla sobre la base de modelos experimentales que se instituyen como los auténticos articuladores del conocimiento:

> *"El uso del término `ley´ parece ser más bien una moda pasajera del siglo XIX que pronto se desvaneció, de modo que casi ninguna ley nueva se ha formulado explícitamente en química (y física) desde principios del siglo XX"* (Schummer 2014, p.99).

3.2. Estrategia monista respecto al sentido de ley

Una segunda estrategia es adoptar un criterio homogéneo y afirmar de hecho que las leyes en química son de igual tipo que las leyes en física. Esta estrategia tiene un carácter fuertemente disruptivo ya que tal homogeneidad no se produce por el hecho de que todas las leyes sean universales o verdaderas sino, por el contrario, porque ninguna de ellas lo son. En efecto, en *Do the laws of Physics State the Fact?* Cartwright afirma que si el criterio para la legalidad es la universalidad y la verdad *"entonces es la física la ciencia de segunda categoría; no solamente sus leyes tienen excepciones sino que ni siquiera se cumplen en la mayor parte de los casos ya que ni siquiera son aproximadamente verdaderas"* (Cartwright, 1980, p.75). La idea que subyace en el pensamiento de Cartwright es que las leyes no tienen aplicabilidad universal ya que si las consideramos literalmente en su formato ideal son falsas, y a su vez, si las consideramos en sus dominios específicos son locales, es decir, no son universales (*cfr.* Cartwright, 1983, 1994). Para la autora la posibilidad de aplicar una ley depende de una serie de condiciones que hace que su verdad sólo pueda dirimirse en un marco experimental específico. Siendo que la teoría sólo puede ser validada en el marco de ciertos modelos que especifican las condiciones de aplicabilidad de las leyes, Cartwright sostiene que la ciencia no brinda una imagen general sino una imagen parcial, cuarteada y fragmentada del mundo: *"la naturaleza está gobernada en diferentes dominios por diferentes sistemas de leyes que no están necesariamente relacionadas entre sí de una manera sistemática o uniforme"* (Cartwright, 1994, p.289).

Por su parte Vihalemm (2003) también adopta una postura uniforme en relación a las leyes afirmando que no habría una diferencia esencial entre leyes químicas y físicas ya que las mismas no son enunciados universalmente verdaderos sino idealizaciones que sólo se aplican en condiciones ideales. Las excepciones propias de las leyes no atentan contra su legalidad pues aquellas se producen cuando se aplican a sistemas reales mientras que las leyes estrictamente se configuran en un marco idealizado. En este sentido, a diferencia de otros autores, Vihalemm no está en contra de tomar a la física como modelo para entender la noción de ley sino en adoptar posturas clásicas y anticuadas respecto a lo que la noción de ley implica. Si entendiéramos de un modo adecuado la noción de ley como idealización entonces se podría advertir, afirma Vihalemm que *"las leyes de la química son leyes naturales en la misma medida que las leyes de la física. La ley descubierta por Mendeleev es una ley natural normal. (...) Es exacta en el mismo sentido filosófico que las leyes de la física. El sistema periódico de elementos químicos se*

estableció mediante la construcción de un sistema idealizado de elementos idealizados" (Vihalemm, 2003, p.7).

3.3. Estrategia pluralista respecto al sentido de ley

La tercera y última estrategia sería defender una perspectiva heterogénea que rechace cualquier criterio normativo que asuma como norma general una definición parcial de legalidad a partir de la cual se juzgue la potestad relativa de las demás leyes científicas. En contraposición esta perspectiva de análisis advierte que cada disciplina impone legítimamente sus propios criterios. La idea subyacente radica en que dada la complejidad y diversidad de sistemas físicos estudiados, y dada la especificidad de los conceptos químicos, no tiene sentido metodológico ni epistemológico promulgar un único criterio de ley. El espíritu que en parte se esconde detrás de esta estrategia es considerar que dado que los químicos utilizan conceptos como \`sustancia´, \`molécula´, \`reactividad´, \`enlace´, \`capas de valencia´ que no son miembros de la misma clase que los utilizados por los físicos entonces no tiene sentido tratar de buscar un criterio común y único para la noción de ley.

Ahora bien, esta perspectiva es asumida por diferentes autores por diferentes razones. Theobald (1976) por ejemplo defiende esta postura afirmando una diferencia metodológica y explicativa entre las disciplinas: mientras que la física es una disciplina altamente matematizada que permite el desarrollo de teorías de difícil testeo como las leyes cosmológicas, la química se ocupa de un universo sustancial con propiedades observables. Theobald ilustra esta pluralidad explicativa con la siguiente analogía: *"La mayoría de los filósofos reconocen que (...) el comportamiento de un conjunto de individuos no es predecible a partir del comportamiento de los individuos que componen ese conjunto. ¿Qué argumento concluyente existe de que no existe tal diferencia entre el comportamiento de los átomos y los electrones y el comportamiento de esas colecciones de átomos y electrones que llamamos moléculas?"* (Theobald, 1976, p.211). Según el autor, para el químico, en particular para el desarrollo de la tarea química, no es relevante contemplar lo que puedo o no ser comprendido desde la física sino lo que es necesario para poder dar cuenta del problema químico; y precisamente por ello afirma que los fundamentos de la química son diferente e independientes a los fundamentos de la física ya que *"el químico generalmente no necesita mirar más allá de la molécula, el átomo y el electrón para comprender los fenómenos químicos"* (Theobald, 1976, p.210)

En cambio, Christie y Christie (Christie 1994; Christie y Christie 2003) abogan a favor de un criterio heterogéneo pero por otras razones. Según las autoras la tarea de la filosofía es describir lo que de hecho hacen los científicos. Con este precepto afirman que si se observa la práctica científica lo que se advierte es una multiplicidad de leyes diferentes: hay leyes exactas, aproximadas, puramente formales, universales, locales o incluso leyes que, como la ley de Dalton, ni siquiera tiene una formulación precisa. Denunciando el sesgado criterio que adoptan los filósofos al buscar siempre condiciones necesarias y suficientes que permitan abarcar con un mismo criterio universal e invariante la multiplicidad de cosas existentes, las autoras afirman que *"la mejor política es definir ley de tal manera que incluya la mayoría o la totalidad de las diversos enunciados que los científicos han elegido considerar como leyes"* (Christie, 1994, p.629). Es decir, sin más preámbulos y adoptando una perspectiva pluralista y menos rígida, las autoras consideran que el derecho de la legalidad química está garantizado en su misma existencia, o en otras palabras, que será ley todo aquello que los científicos decidan llamar así.

Por su parte, Scerri y McIntyre (1997) pretenden brindar una taxonomía que permita clarificar la diferencia entre leyes físicas y leyes químicas y de ese modo legitimar dentro de sus límites el estatus legal de sus respectivos enunciados. Tomando la ley periódica como modelo los autores afirman que mientras que las leyes de la física como la ley gravitatoria o la ley de conservación de la energía son exactas, las leyes de la química se caracterizan por ser aproximadas. Por aproximadas los autores entienden dos cosas: en primer lugar que las predicciones elaboradas a partir de la ley periódica, como por ejemplo las realizadas por Mendeleev respecto al galio, germanio y escandio, no se produjeron a partir de algoritmos deductivos en conjunción con ciertas condiciones iniciales, sino como producto de ciertas intuiciones químicas no formalizables. En segundo lugar, el carácter aproximativo de la ley periódica se debe a que la tabla, en su elaboración temprana, al ordenarse en función del peso atómico, presentaba una serie de contraejemplos que le conferían a la tabla periódica el carácter de inexactitud respecto al orden de los elementos (*cfr.* Scerri y McIntyre, 1997 y Scerri y Worrall, 2001).

La última propuesta que se enmarca dentro del proyecto pluralista respecto a la noción de ley es el presentado por Tobin (2013). La autora desarrolla una taxonomía al interior de las leyes químicas que permitiría, en línea de continuidad con el criterio heterogéneo, explicar las peculiaridades de la química. Con tales fines distingue dos tipos

de procedimientos que serían distintivos y explicativos de las leyes químicas: las aproximaciones y las idealizaciones. Para caracterizarlas introduce un criterio clave: la cláusula *ceteris paribus* (CCP) (para un análisis profundo y clásico en torno a CCP, ver Hempel 1988). Literalmente esta locución significa 'las demás cosas siguen igual' y en el contexto de la ciencia se utiliza para mantener ciertas variables constantes o para no considerar interferencias de factores externos relevantes. En particular la relevancia del concepto se debe a que nos advierte que la simplicidad de la ley involucra siempre algún tipo de distorsión que garantiza su aplicabilidad. Tobin, por su parte, introduce esta cláusula para diferenciar leyes idealizadas de leyes aproximadas. En las leyes idealizadas la CCP anula la multiplicidad causal de modo tal que en un contexto de aislamiento se pueda estudiar la variable de interés. En cambio, en las leyes aproximadas la CCP señala la ausencia del contexto ya que se anulan o se incluyen ciertas variables para que la ley se mantenga inmune a los contraejemplos. En este último sentido la CCP se vuelve imprescindible porque el contexto podría dictar excepciones genuinas a la ley. En parte esta distinción en torno a la noción de CCP le permite circunscribir las excepciones en el marco de las leyes aproximadas; catalogando y estipulando de este modo y bajo esta categoría, la autenticidad de las leyes químicas: *"las leyes químicas aproximadas, como mínimo, son epistémicamente útiles en la medida en que guían la práctica futura, destacan anomalías y problemas y los casos excepcionales se convierten en un tema interesante para futuras investigaciones. Por tanto, en la práctica de la química es claramente cierto que tanto las leyes idealizadas como las aproximadas deben considerarse leyes científicas"* (Tobin, 2013, p.1590).

4. Conclusión

En este capítulo tratamos de abordar un problema clásico en la filosofía de la ciencia desde la perspectiva que nos provee el campo de la química. Para ello primero introdujimos la problemática en el contexto de la filosofía general de la ciencia tratando de identificar, sin pretensión de exhaustividad y sólo a fines introductorios, los principales problemas y las principales posturas alrededor de las cuales se configuró la discusión en torno a las leyes científicas Luego abordamos las peculiaridades que generan específicamente las leyes químicas y enumeramos tres estrategias en orden de contemplar diferentes modos para abordar el problema de las leyes en química: la estrategia eliminativista, la estrategia monista y la estrategia pluralista sobre las leyes químicas.

Referencias bibliográficas

Armstrong, D. (1983). *What is a Law of Nature?*. Cambridge University Press: Cambridge.

Beebee, H. (2000). "The Non-Governing Conception of Laws of Nature". *Philosophy and Phenomenological Research* 61: 571–594.

Bigelow, J., Ellis, B. y Lierse C. (1992). "The World as One of a Kind: Natural Necessity and Laws of Nature". *The British Journal for the Philosophy of Science* 43: 371–388.

Bird, A. (2007). *Nature´s Metaphysics: Properties and Laws*. Oxford University Press: Oxford.

Borge, B. (2016). "Sobre la relación entre los realismos científicos, modal y nomológico". *Kriterion* 135: 619–639.

Cartwright, N. (1980). "Do the laws of physics state the facts?". *Pacific Philosophical Quarterly* 61: 75–84.

Cartwright, N. (1983). *How the Laws of Physics Lie*. Clarendon Press: Oxford.

Cartwright, N. (1994) "Fundamentalism vs. the Patchwork of Laws". *Proceedings of the Aristotelean Society* XCIV: 279-292.

Chisholm, R. (1946). "The Contrary-to-Fact Conditional". *Mind* 55: 289–307.

Christie, M. (1994) "Philosophers versus Chemists Concerning `Laws of Nature´". *Studies in History and Philosophy of Science* 25: 613–629.

Christie, J. y Christie, M. (2003). "Chemical Laws and Theories: a response to Vihalemm". *Foundations of Chemistry* 5: 165–174.

Diez. J. A. y Moulines C. U. (1997). "Las leyes científicas". En *Fundamentos de Filosofía de la Ciencia*. Barcelona: Ariel, pp.125–172.

Dirac, P. A. M. (1929). "Quantum Mechanics of Many-Electron System". *Proceedings of the Royal Society of London* 123: 714–733.

Dretske, F. (1977). "Laws of Nature". *Philosophy of Science* 44: 248–68.

Duhem, P. (1954) *The Aim and Structure of Physical Theory.* Princeton: University Press Princeton.

Ellis, B. (2001). *Scientific Essentialism*. Cambridge University Press: Cambridge.

Ellis, B. (2010). Causal Powers and Categorical Properties. En: Marmodoro, A. (eds.). *The Metaphysics of Powers: Their Grounding and Their Manifestations*. Routledge: London, pp.133–142.

Giere. R. N. (1988). *Explaining Science: A Cognitive Approach*. University of Chicago Press: Chicago.

Giere, R. N. (1999). *Science without laws*. University of Chicago Press: Chicago.

Goodman, N. (1947). "The Problem of Counterfactual Conditionals". *The Journal of Philosophy* 44: 113–128.

Goodman, N. (1979). *Fact, Fiction and Forecast* . Harvard University Press: Massachusetts.

Hempel. C. (1988). "Provisoes: a problem concerning the inferential function of scientific theories". *Erkenntnis* 28: 147–164.

Hempel, C. y Oppenheim, P. (1948). "Studies in the logic of explanation". *Philosophy of Science* 15: 135–175.

Labarca, M y Martínez González, J. C. (2019). "Acerca de los elementos pertenecientes al grupo 3 de la tabla periódica: un nuevo enfoque". *Theoria* 34: 297–310.

Labarca, M y Srivaths, A. (2016). "On the Placement of Hydrogen and Helium in the Periodic System: A New Approach Chemistry". *Bulgarian Journal of Science Education* 25: 514–530.

Lange, M. (1993). "Natural Laws and the Problem of Provisos". *Erkenntnis* 38: 233–248.

Lewis, D. (1973). *Counterfactuals*. Blackwell: Oxford.

Mumford, S. (2004). *Laws in Nature*. Routledge: London.

Nagel, E. (1968). *La estructura de la ciencia.* Paidós: Buenos Aires.

Perez, D. (1996). "Leyes y contrafácticos". En: Velasco, M. y Saal, A. (eds.). *Selección de Jornadas de las VI Jornadas Epistemología e Historia de la Ciencia*. Córdoba: Universidad de Córdoba, pp.219–226.

Reichenbach, H. (1953). Las leyes de la Naturaleza. En Flores Sánchez, H. (trad.). *La filosofía científica*. México: Fondo de Cultura Económica, pp.146–153.

Scerri, E. y McIntyre, L (1997). "The case for the philosophy of Chemistry". *Synthese* 111: 213–232.

Scerri, E. y Worrall, J. (2001). "Prediction and the periodic table". *Studies in History and Philosophy of Science* 32: 407–452.

Schummer, J. (2014). "The Preference of Models over Laws of Nature in Chemistry". *European Review* 22: S87–S101.

Sober, E. (1988). "Confirmation and Law-Likeness". *The Philosophical Review* 97: 93–98.

Strawson, G. (1989). *The Secret Connexion: Causation, Realism and David Hume*. Clarendon Press: Oxford.

Swoyer, C. (1982). "The nature of natural laws". *Australasian Journal of Philosophy* 60: 203–223.

Theobald, D. W. (1976). “Some Considerations on the Philosophy of Chemistry”. *Chemical Society Reviews* *5*: 203–213.
Tobin, E. (2013). “Chemical Laws, Idealization and Approximation”. *Science & Education* 22: 1581–1592.
Tooley, M. (1977). “The nature of Laws”. *Canadian Journal of Philosophy* 7: 667–698.
van Fraassen, B. C. (1985). “¿Qué son las leyes de la naturaleza?”. *Diánia* 31: 211–261.
van Fraassen, B. (1989). *Laws and symmetry*. Oxford: Oxford University Press.
Vihalemm, R. (2003). “Are Laws of Nature and Scientific Theories Peculiar in Chemistry? Scrutinizing Mendeleev’s Discovery”. *Foundations of Chemistry* 5: 7–22.
Wright, J. P. (1983). *The Sceptical Realism of David Hume*. Manchester University Press: Manchester.

CAPÍTULO 10

Nanoquímica y química supramolecular: algunas consideraciones filosóficas

Alfio Zambon y Fiorela Alassia

Facultad de Ciencias Naturales y Ciencias de la Salud, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco

La metódica elaboración de hrönir (dice el Onceno Tomo) ha prestado servicios prodigiosos a los arqueólogos. Ha permitido interrogar y hasta modificar el pasado, que ahora no es menos plástico y menos dócil que el porvenir. Hecho curioso: los hrönir de segundo y de tercer grado -los hrönir derivados de otro hrön, los hrönir derivados del hrön de un hrön- exageran las aberraciones del inicial; los de quinto son casi uniformes; los de noveno se confunden con los de segundo; en los de undécimo hay una pureza de líneas que los originales no tienen. El proceso es periódico: el hrön de duodécimo grado ya empieza a decaer. Más extraño y más puro que todo hrön es a veces el ur: la cosa producida por sugestión, el objeto educido por la esperanza

Jorge Luis Borges[11]

1. Introducción

En el cuento de Jorge Luis Borges '*Tlön, Uqbar, Orbis Tertius*' se narran características de un planeta ficticio donde impera una ontología idealista. En dicho planeta existe un fenómeno que se desprende de la tesis del idealismo, la multiplicación de los objetos a partir de la construcción que la mente hace de ellos, que el autor denomina '*hrönir'*. Esta multiplicación no es perfecta, sino que incluye modificaciones tanto sutiles como apreciables del objeto inicial. En algún sentido, podemos considerar que es posible trazar una analogía con la reproducción que mediante diversos métodos se da en las estructuras nanomoleculares o en las moléculas obtenidas mediante procesos de síntesis supramolecular. En este capítulo abordaremos sucintamente algunos de los problemas filosóficos relevantes en este entorno. Antes, describiremos brevemente algunos términos

[11] Fragmento del cuento "Tlön, Uqbar, Orbis Tertius" (Borges, 2012, pp.86-87).

y conceptos propios de estos campos científicos que resultarán de utilidad en las secciones subsiguientes.

> ‘Nano’ es un prefijo griego que significa ‘pequeño’, ‘diminuto’. Se utiliza en el Sistema Internacional de Unidades (S.I.) para indicar un factor de 10^{-9} -por ejemplo, 1 nanómetro (nm) equivale a 10^{-9} m. El campo de las *nanociencias* está conformado por disciplinas que estudian objetos que se encuentran en una escala de tamaño nanométrica, es decir, entre 1 y 100 nm (Schaefer, 2010). La *nanoquímica*, en particular, tiene bajo su estudio moléculas o compuestos químicos en dicha escala. El término *nanotecnología* tiene muchas definiciones, pero puede entenderse como el conjunto de técnicas desarrolladas para la fabricación de materiales, estructuras, dispositivos y sistemas funcionales mediante el control y ensamblaje a escala nanométrica (Cao, 2004; Gago, 2010).

Cuando la materia se expone a métodos nanotecnológicos, aparecen los *nanomateriales.* En el lenguaje técnico, cuando se hace referencia a esta escala se suele expresar que ésta corresponde al nivel u “orden molecular” (*cfr.* Buzea, Pacheco y Robbie, 2007; Drexler, 1992; Whitesides, Mathias y Seto, 1991). Sin embargo, la dimensión de los nanomateriales está por encima del nivel molecular y es precisamente esa escala nanométrica que trasciende las moléculas individuales la que conduce a sus peculiares propiedades químicas y físicas (Cao, 2004; Gago, 2010). Hoy en día, los nanomateriales motivan un gran número de aplicaciones y conforman un campo de estudio altamente interdisciplinario, que incluye las ciencias de los materiales, la química ambiental, la química farmacéutica, la química analítica, entre otras disciplinas (Buzea, Pacheco y Robbie, 2007; Whitesides, Mathias y Seto, 1991).

Por su parte, el término *química supramolecular* fue utilizado durante muchos años en el contexto del campo de estudio de las estructuras bioquímicas complejas; también fue definido por el premio Nobel de Química de 1987, Jean-Marie Lehn, como la “química más allá de la molécula” (Cragg, 2005, traducción propia). Esta definición resulta demasiado amplia, dado que prácticamente cualquier reacción química puede ser considerada como *más allá de la molécula*. Sin embargo, el concepto de química supramolecular tiene implícito un acto de diseño tendiente a la obtención de ensamblados supramoleculares que presenten determinadas propiedades deseables, como por ejemplo,

la liberación controlada de fármacos, la detección de agroquímicos en cursos de agua, e incluso su funcionamiento como ‘chips’ informáticos químicos (Cragg, 2005).

Acorde a Joachim Schummer (2006), la química supramolecular se caracteriza por el interés no solo en comprender sino más específicamente en crear o construir nuevos sistemas moleculares a partir de dos o más moléculas asociadas por fuerzas intermoleculares, y que realicen ciertas funciones. No funciones químicas simples (como en una reacción química cualquiera), indica Schummer, sino de otro tipo, como por ejemplo, mecánicas, eléctricas, electrónicas, ópticas y biológicas. En este sentido, la química supramolecular y la nanoquímica no solo comparten estos objetivos en gran parte, sino que también presentan similitudes químicas y funcionales que justifican su abordaje filosófico conjunto.

En este capítulo abordaremos a modo de ‘vuelo de pájaro’ algunos aspectos que fueron trabajados desde la filosofía de la ciencia y de la tecnología en el campo de la nanoquímica y la química supramolecular, dos de las áreas más vertiginosas y prometedoras de la práctica científica actual. Para ello organizaremos el capítulo de la siguiente manera: en la Sección 2 presentaremos una breve caracterización de los compuestos nanoquímicos y supramoleculares, repasando el tipo de interacciones químicas involucradas (Sección 2.1), fenómenos y compuestos supramoleculares (Sección 2.2), metodologías de obtención de nanopartículas (Sección 2.3) y un breve repaso del surgimiento histórico de las nanociencias (Sección 2.4). En la Sección 3 recorreremos diferentes abordajes filosóficos realizados en el campo de la nanoquímica y la química supramolecular, en los cuales se han abordado cuestiones como, por ejemplo, la ontología de las entidades nanoquímicas (Sección 3.1), el rol de la emergencia inter e intranivel (Sección 3.2), la influencia de valores estéticos en la química supramolecular (Sección 3.3) y la importancia de los aspectos éticos (Sección X.3.4.). Concluiremos el capítulo con las Consideraciones Finales, donde discutiremos y resumiremos los aspectos más relevantes abordados, reflexionaremos acerca de los aspectos abordados y especularemos sobre las proyecciones potenciales de la investigación filosófica en este campo.

2. Compuestos nanoquímicos y supramoleculares: una breve caracterización

2.1. Interacciones químicas

La problemática filosófica inherente al enlace químico no forma parte del objetivo de este capítulo. No obstante, para la comprensión de los fenómenos nanoquímicos y supramoleculares resulta relevante repasar algunas características generales de los enlaces químicos e interacciones intermoleculares que forman parte de los fenómenos que ocurren en estos dominios científicos.

Para comenzar, es necesario distinguir entre las interacciones covalentes, de mayor energía, y las no covalentes, de menor energía. En las interacciones del primer tipo se comparten los electrones de valencia de los átomos enlazados, lo cual motiva una distancia interatómica relativamente baja en comparación con otro tipo de interacciones químicas. El rango de energía involucrada en los enlaces covalentes varía entre 150 KJ mol^{-1} y 450 KJ mol^{-1}, aproximadamente. Cuanto mayor es la energía del enlace covalente, menor es la distancia entre los átomos involucrados. Este tipo de enlaces pueden presentar polarización si la diferencia de electronegatividad entre los átomos involucrados así lo determina. Además, tienen la característica de que pueden ser múltiples (dobles o triples) y también tienen alta dependencia de la orientación espacial en el contexto de la molécula.

El segundo tipo de interacciones mencionadas son las no covalentes, considerablemente más débiles que las covalentes y las más relevantes para el tema del presente capítulo, porque incluyen un amplio rango de atracciones y repulsiones químicas que son fundamentales para el ensamblado y estabilidad de los compuestos nanoquímicos y supramoleculares. Si bien cada interacción vista de manera individual tiene un efecto débil en comparación con los enlaces covalentes, es posible la formación de interacciones muy estables cuando se disponen de manera cooperativa. Entre las interacciones no covalentes, las de mayor energía son las electrostáticas, como por ejemplo, las interacciones ion-ion y ion-dipolo. Le siguen, en orden de magnitud energética, las interacciones dipolo-dipolo (ver Tabla 1).

Interacción	Energía (KJ mol^{-1})	Ejemplo
Ión-ión	200-300	Cloruro de tetrabutilamonio
Ión-dipolo	50-200	Sodio (15) corona-5
Dipolo-dipolo	5-50	Acetona
Enlace de hidrógeno	4-120	ADN
Catión π	5-80	K^+ en el benceno
π – π	0-50	Benceno y grafito
Van der Waals	< 5	Argón, empaquetamiento de los cristales moleculares
Hidrófoba	Interacción disolvente-disolvente	Compuestos de inclusión en ciclodextrinas

Tabla 1. Valores de Energía de enlace (KJ mol^{-1}) y ejemplos de compuestos para cada tipo de interacción no covalente (Claramunt Vallespi, Farrán Morales y López García, 2013, p. 37)

Una de las interacciones no covalentes de mayor interés es un tipo particular de interacción dipolo-dipolo conocida como ‘enlace de hidrógeno’. Estos enlaces tienen un rol importante en el campo del diseño molecular. El enlace de hidrógeno consiste en la interacción entre un grupo dador (D) y uno aceptor (A) de hidrogenión (H^+). La energía involucrada es variable, pero puede alcanzar valores considerablemente elevados (ver Tabla 2). Estos enlaces, muy comunes en la naturaleza, están influidos por la direccionalidad, encontrándose interacciones directas entre el grupo dador y el aceptor de manera lineal, de forma inclinada, bifurcada o compartida.

D-H…A	**Fuerte**	**Moderado**	**Débil**
	Principalmente covalente	**Principalmente electrostático**	**Electrostático**
Energía (KJ mol^{-1})	60-120	16-60	< 12
Longitud (Å): H…A D…A	1,2-1,5 2,2-2,5	1,5-2,2 2,5-3,2	2,2-3,2 3,2-4,0
Ángulo de enlace (º)	175-180	130-180	90-150
Ejemplos	Complejos HF	Ácidos, alcoholes, ADN	C-H…A D-H…π

Tabla 2. Valores de energía (KJ mol^{-1}), longitud (Å), ángulo de enlace (grados, º) y ejemplos para diferentes tipos de enlaces de hidrógeno (D-A…A): fuerte, moderado y débil (Claramunt Vallespi, Farrán Morales y López García, 2013, p.40)

Finalmente, otro tipo de interacciones no covalentes de interés para la temática que nos ocupa son las que involucran bajos valores de energías, siendo principalmente fuerzas repulsivas. Entre ellas encontramos a las interacciones π, las fuerzas de van der Waals y las interacciones hidrófobas. Son interacciones débiles, inespecíficas y fluctuantes, pero su acción combinada puede conferir una estabilidad importante a una asociación molecular particular, circunstancia que resulta de especial relevancia en el nivel supramolecular.

2.2. Fenómenos y compuestos supramoleculares

El químico Jean Marie Lehn (nacido en 1939) definió a la química supramolecular como la química de los enlaces intermoleculares no covalentes que estudia las estructuras y funciones de entidades formadas por dos o más especies químicas (Lehn, 1988). El desarrollo de la química supramolecular está ligado al estudio de los sistemas biológicos, en particular al fenómeno de reconocimiento entre moléculas biológicas para formar estructuras complejas. Este campo de conocimientos también involucra la construcción de materiales y dispositivos que suelen llamarse 'inteligentes', ya que mediante el dominio tecnológico logran mimetizar procesos que existen en la naturaleza.

Los sistemas supramoleculares están formados a partir de 'ladrillos' de construcción molecular que se mantienen unidos mediante interacciones intermoleculares reversibles no covalentes, como enlaces electrostáticos o enlaces de hidrógeno. Estas uniones son inherentemente reversibles, una condición que es esencial para muchas de las funciones expresadas por los sistemas supramoleculares, como la detección química, la catálisis y el transporte (Steed y Atwood 2009). Entre los muchos factores que controlan y afectan el comportamiento de los sistemas supramoleculares, así como también los sistemas nanoquímicos, es importante destacar que la solvatación juega un papel esencial (Kanagaraj *et al.* 2017).

En el contexto de la química supramolecular podemos distinguir dos grandes categorías de fenómenos. Por un lado, los procesos de *auto-ensamblado*, en los que el objetivo es alcanzar un equilibrio entre dos o más componentes moleculares que producen un agregado supramolecular. Por otro lado, el fenómeno de reconocimiento molecular,

donde los participantes de esta interacción se denominan *receptor* y *ligando* (o *sustrato*). Los receptores[12] generalmente son moléculas grandes que pueden incorporar a una molécula pequeña, mediante un proceso de inclusión conocido como *química huésped-anfitrión* (H-A) o *host-guest*, en el cual la estructura 'anfitriona' o receptor, debido a su forma y tamaño, puede 'alojar' a una estructura huésped o sustrato. La molécula huésped posee en su estructura centros de enlace convergentes, principalmente grupos dadores de electrones, como las bases de Lewis, o dadores para la formación de enlace de hidrogeno. La molécula anfitriona posee centros de enlace divergentes, como cationes metálicos que actúan como ácidos de Lewis o grupos aceptores de enlace de hidrogeno. El fenómeno de reconocimiento molecular, de gran importancia en la química biológica, suele describirse mediante la *hipótesis de la llave-cerradura*, formulada por el químico Emil Fischer (1852-1919) en 1894.

Entre los aspectos químicos importantes de la química supramolecular podemos destacar la estabilidad termodinámica de los complejos H-A. Es necesario estudiar el equilibrio entre el complejo H-A y las concentraciones de H y A, de manera de seleccionar un rango de concentración donde existan cantidades significativas de las tres especies, lo que facilita la determinación de la constante de equilibrio. También es importante conocer la preferencia de la especie H por alguna especie A determinada, lo que asegura la selectividad de la unión. En ese sentido, hay dos maneras básicas de controlar la selectividad, mediante el control cinético o termodinámico de la reactividad.

2.3. Metodologías generales de obtención

Durante las últimas décadas se han desarrollado un conjunto de técnicas operativas para sintetizar nanomateriales. En la práctica química se pueden encontrar dos grandes enfoques para la síntesis: el enfoque '*top-down*' (de arriba hacia abajo) y la estrategia '*bottom-up'* (de abajo hacia arriba). En el primer caso se parte del nivel macroscópico y se llega al nano nivel por medios tecnológicos de "miniaturización". En cambio, el segundo caso consiste en manipular la materia a escala atómica y molecular para luego llegar de forma ascendente a los nanomateriales (*cfr*. Cao 2004, Gago 2010; Rao *et al.* 2004; Schmid 2004).

[12] Entre los receptores en química supramolecular encontramos tres tipos básicos: receptores de cationes, aniones o moléculas neutras (*cfr*. Steed y Atwood, 2009).

El enfoque *top-down* consiste en la división de los sólidos en porciones más pequeñas. Este enfoque incluye métodos mecánicos (como la molienda), métodos químicos y físicos como la volatilización de un sólido y la posterior condensación de los componentes volatilizados. Los métodos más importantes que utilizan este camino de obtención son los siguientes (Gago, 2010. Rao *et al.*, 2004; Schmid, 2004; Zanella, 2012):

1- La evaporación térmica, que consiste en calentar el material a depositar hasta su evaporación y posterior condensación en vacío con el depósito de una película fría.

2- El depósito químico en fase vapor, que consiste en la descomposición de uno o más compuestos volátiles en una cámara de vacío y cerca de la superficie de un sólido para formar una película delgada de material nanoparticulado.

3- La preparación de racimos gaseosos por medio de un láser pulsado de alta potencia para producir vapores atómicos metálicos, que son transportados en un gas inerte y posteriormente depositados en un óxido monocristalino u otro sustrato.

4- La implantación de iones de un material en un sólido, lo que modifica las propiedades físicas y químicas de este último ya que el ion implantado puede ser de un elemento diferente al que lo compone.

5- La trituración de partículas de tamaño macro o micrométrico mediante molinos de alta eficiencia, en la cual las partículas resultantes se separan por medios físicos, pudiendo recuperarse las de tamaño nanométrico.

La segunda estrategia metodológica *bottom-up* consiste en la fabricación de nanopartículas mediante la condensación de átomos o entidades moleculares en una fase o solución gaseosa (Zanella, 2012). Estos métodos generalmente comienzan con la reducción de iones metálicos a átomos metálicos y luego, la agregación controlada de los últimos (Schmid, 2004; Zanella, 2012). Los métodos más importantes en este caso son:

1- El método coloidal, en el cual se parte de partículas en una solución coloidal (las cuales generalmente oscilan en un rango nanométrico).

2- La reducción fotoquímica y radioquímica, en la cual se utilizan altas energías asociadas a la generación de reductores potentes altamente activos, como electrones, radicales y especies excitadas.

3- La radiación de microondas, un método de calentamiento alternativo rápido y eficaz, en el cual no siempre se logra un control preciso en la morfología.

4- El uso de dendrímeros, macromoléculas de elevado peso molecular y altamente ramificadas que incluyen un núcleo central, unidades intermedias repetitivas y grupos funcionales terminales, y que representan nanoreactores naturales.

5- La síntesis solvotermal, que involucra el calentamiento por encima del punto de ebullición de un precursor metálico disuelto en un líquido y en un recipiente cerrado.

6- El método sol-gel, que se basa en una solución química o sol que actúa como precursor de una red integrada de partículas discretas o una red de polímero.

2.4. Surgimiento histórico de las nanociencias

La conferencia titulada *'There's plenty of room at the bottom'*, que el físico Richard Feynmann brindó en el California Institute of Technology (Caltech) en 1959, es usualmente considerada como un episodio fundacional de las nanociencias. En su discurso, Feynmann indicó de forma explícita la posibilidad de controlar la materia a escala atómica (Feynman, 1960). Sin embargo, no utilizó una terminología específica para la nanoescala ni tampoco trabajó específicamente en el desarrollo del campo. Fue el científico Norio Taniguchi quien utilizó el término 'nanotecnología' por primera vez. En su artículo de 1974, *'On the Basic Concept of Nanotechnology'*, se refirió a la nanotecnología como la tecnología que puede separar, consolidar y deformar materiales átomo por átomo y molécula por molécula (Taniguchi, 1974, citado en Gago, 2010, p.37).

Más de una década después, la publicación del libro '*Engines of Creation'* de Eric Drexler (1986) supuso otro hito en el desarrollo de la disciplina. El autor concibió la capacidad de las nanomáquinas para construir una gran cantidad de dispositivos mediante el ensamblaje de molécula por molécula de forma autónoma como una posibilidad en un

futuro relativamente cercano. La amplia repercusión de este libro dio a la nanociencia una enorme visibilidad.

En 1981, un grupo de investigadores del IBM *(International Business Machines Corporation)* desarrolló el Microscopio de Túnel de Barrido (STM), que permitió controlar las técnicas de manipulación en el nano-nivel mediante la obtención de imágenes con una buena resolución en esa escala. El funcionamiento del STM se basa en la interacción suave entre la punta y la muestra: la punta se mueve a través de la muestra obteniendo señales que pueden decodificarse; en particular, una corriente de polarización aplicada entre la punta y la superficie de la muestra permite que los electrones se muevan de lado a lado (lo que se denomina *efecto túnel*), obteniendo una corriente que puede ser monitoreada. Posteriormente, se desarrollaron otros microscopios relacionados, como la Microscopía de Túnel de Barrido de Fotones, la Potenciometría de Túnel de Barrido y la Microscopía de Fuerza Atómica. Entre los logros más relevantes obtenidos gracias al desarrollo y la aplicación de estas técnicas se encuentran la síntesis de los fullerenos[13] a partir de 1985 y el redescubrimiento del grafeno[14] en 1994.

3. Algunas consideraciones filosóficas en nanoquímica y química supramolecular

3.1. Sobre la naturaleza ontológica de las entidades nanoquímicas

La enorme relevancia de la nanoquímica se considera aquí como una invitación a preguntarse sobre la naturaleza de las entidades constitutivas del ‘nanomundo’. Entonces, desde un punto de vista que considera los problemas epistemológicos desde una perspectiva ontológica, se ha analizado la cuestión acerca de qué son los ítems que pueblan el mundo o dominio ‘nano’. Para ello, tomaremos el concepto de categoría ontológica (*cfr.* Lewowicz y Lombardi, 2013), haciendo referencia a lo que conlleva la responsabilidad de estructurar la realidad. Lucía Lewowicz y Olimpia Lombardi (2013) apelan al concepto de categoría ontológica, que son formas de estructurar la realidad, de decir de qué tipos de entidades está poblado el amueblamiento del mundo. Las categorías

[13] Los fullerenos son estructuras formadas por sesenta átomos de carbono dispuestos en doce pentágonos y hexágonos, cuya representación molecular muestra similitud a una pelota de fútbol (véase Sección 3.3, Figura 1).

[14] El grafeno es un material constituído por átomos de carbono dispuestos en un patrón hexagonal regular similar al grafito, pero en láminas planas que tienen un solo átomo de espesor.

ontológicas imponen una estructura a los dominios científicos, de manera que la estructura ontológica de un dominio dado puede ser capturada por las categorías formales de un lenguaje también organizado por esas categorías. El poder de elucidación de esta noción consiste en que puede explicar la existencia de un discurso significativo sobre un dominio científico y, en consecuencia, las formas exitosas de hacer inferencias sobre lo que ocurre en él.

Para Lewowicz y Lombardi (2013), el ámbito de la química molecular es un dominio poblado por 'individuos' con propiedades, mientras la ontología adecuada para la química macroscópica sería la de '*stuff*' o materia macroscópica. En este sentido, 'individuos' y '*stuff*' serían dos categorías ontológicas diferentes. Por un lado, los individuos tienen un principio de individualidad, es decir, se diferencian de otros individuos tanto en el espacio como en el tiempo. Además, son indivisibles, dado que si se dividen, el resultado de la división son diferentes individuos respecto del original. Si los individuos se agrupan, forman una clase; sin embargo, en un agrupamiento o conglomerado, los individuos mantienen su identidad individual. Es decir, los individuos pueden re-identificarse y, además, son entidades contables. Otra característica es los individuos, al ser el bloque fundamental de la realidad, son el sustento de las propiedades. En otras palabras, son los individuos quienes portan las propiedades.

Por otro lado, la categoría de *stuff* presenta otra serie de características diferentes a la categoría de individuo. Una materia o *stuff* es susceptible de ser dividida, pero su división resulta en porciones del mismo *stuff*, es decir, no resulta en 'otros' *stuff*. Dado que *stuff* no es una entidad contable, su agrupamiento o mezcla resulta en 'más *stuff*', en la cual ya no es posible re-identificar a las porciones que dieron origen una vez realizada la mezcla. Un aspecto importante del *stuff* es que es una y múltiple, al mismo tiempo.

Tanto la perspectiva de los individuos como la de *stuff* presentan limitaciones en el área de la nanotecnología y los nanomateriales. Según Mariana Córdoba y Alfio Zambon (2017), ambas categorías resultan insuficientes para captar las particularidades de la nanoquímica. Estos autores argumentan que las entidades que pueblan el mundo de la nanoquímica no son ni individuos en el sentido tradicional de la física, ni *stuff* en el sentido de los elementos de la macroquímica, sino que deben concebirse bajo una nueva categoría ontológica de 'nanoindividuos'.

Los nanomateriales consisten en nanopartículas que son contables y si se dividen, resultan en otras partículas con propiedades diferentes. En este sentido, comparten

aspectos de la categoría de individuos. Sin embargo, no son partículas solamente en el sentido físico porque presentan propiedades químicas específicas: reactividad química. En las reacciones, pierden su individualidad y se transforman en otra cosa, pierden su identidad. A pesar de esto, no son un tipo de materia en el sentido tradicional, las propiedades de los nanomateriales cambian con el tamaño de las nanopartículas, dado que dependen de las características de su superficie externa. Además, las propiedades de los nanomateriales pueden ser muy diferentes de las de la sustancia macroscópica correspondiente (*cfr*. Córdoba y Zambon, 2017; Zambon, Córdoba y Lombardi, 2019).

De este modo, se propone una tercera categoría de 'nanoindividuo' que resulta de una síntesis conceptual de las categorías de individuos y de *stuff*, para poder dar cuenta de los nanomateriales. Resulta destacable que la naturaleza intermedia de los nanomateriales entre individuos y cosas se manifiesta de manera clara en el ámbito lenguaje: usamos 'nanopartículas' cuando pensamos en individuos, mientras que hablamos de 'nanomateriales' cuando pensamos en cosas.

3.2. La nanoquímica como un nivel ontológico emergente intra-dominio

Según las metodologías de obtención de nanopartículas descripta en la Sección 2.3 y atendiendo al lenguaje utilizado, se observa que en los métodos *top-down*, el comienzo tiene lugar en el ámbito macroscópico de las sustancias químicas, y el nano-nivel se alcanza por medios tecnológicos de miniaturización. Por el contrario, la estrategia *bottom-up* consiste en 'manipular' átomos y moléculas, es decir, *individuos* (en el sentido descripto anteriormente), para llegar a los nanomateriales.

Según un punto de vista tradicional, la nanoescala está entre esos 'dos mundos', el macro y el micro. Sin embargo, independientemente del procedimiento tecnológico para su obtención, una vez alcanzado el nivel nano, las nanoentidades –los nanoindividuos- se describen en términos de átomos y no en términos de la sustancia correspondiente. Esto sugiere que, aunque en tamaño y masa el nano-nivel es intermedio entre la macroescala y la escala microquímica molecular, cuando se consideran las relaciones entre los tres niveles (el macro, el molecular y el nano), la situación es diferente. Resulta necesario, entonces, esclarecer o caracterizar la relación entre ellos. En este sentido, Zambon y Córdoba (2021) han abordado la cuestión afirmando que la noción de *emergencia*, en particular la distinción entre *emergencia inter-dominio* e *intra-*

dominio, resulta fructífera para dilucidar las relaciones entre los diferentes niveles en química (Lombardi y Ferreira Ruiz, 2019).

Acorde a los autores, en ontología química es posible distinguir tres niveles, correspondientes a la química molecular, la nanoquímica y la macroquímica; y dos dominios, el micro y el macro. De este modo, existe un nivel micro-molecular, un dominio macroquímico y un nano-nivel, que también corresponde al dominio micro. Para los autores, la estructura de relaciones entre estos tres dominios es más más compleja que una visión tradicional jerárquica de tres pasos. Dado que estas relaciones entre los dominios no son lineales ni continuas, los objetos de estudio de los tres niveles no están definidos ontológicamente por su tamaño o masas relativas.

Zambon y Córdoba (2021) sostienen que la emergencia puede explicar adecuadamente la relación entre estos niveles del siguiente modo. El dominio de la microquímica –el de los *individuos*– es el nivel basal del que surge la macroquímica y también el nano-nivel, pero mediante una especie de emergencia 'paralela'. Es decir, la relación de emergencia es de diferente naturaleza en cada caso: la emergencia del nivel macroquímico es una emergencia entre dominios diferentes o *inter-dominio*, mientras que la emergencia del nano-nivel es una emergencia dentro del mismo dominio o *intra-dominio*. El primero es un caso de surgimiento entre dominios porque están involucrados dos dominios gobernados por teorías diferentes –por ejemplo, la termodinámica desde un punto de vista macroscópico, para la macroquímica, y todo el cuerpo teórico de la química estructural y las teorías de enlace químico, para el microdominio.

A diferencia de lo anterior, argumentan Zambon y Córdoba, el nivel micro-molecular y el nano-nivel pertenecen al mismo dominio. Considerando las metodologías de obtención, una vez que se alcanza el nivel nano, los nanoindividuos se describen en términos de átomos y no en términos de la macro-sustancia correspondiente. Las nanoentidades no solamente están compuestas por los elementos atómicos del dominio micro-molecular sino que, además, muchos procesos químicos del nano-nivel dependen de los grupos funcionales en las nanopartículas. En otras palabras, la química de estos objetos está regulada por la naturaleza y posición de esos grupos funcionales y no por su masa y volumen relativo. Los autores agregan que las interacciones entre grupos funcionales de los sistemas nanoquímicos (y supramoleculares) y los disolventes se rigen por las mismas teorías que los sistemas de la química molecular. Estos hechos refuerzan

la afirmación de que el nivel molecular y el nano-nivel pertenecen al mismo dominio ontológico.

De este modo, Zambón y Córdoba avanzan hacia una imagen más precisa, según la cual es posible caracterizar tres niveles en química –cada uno de ellos relacionado a una categoría ontológica diferente-, y dos dominios –el macro y el micro–. Aquí, la relación de emergencia –*inter-dominio* para la relación microquímica y macroquímica, e *intra-dominio* para la relación microquímica y nano-nivel- debe entenderse como una relación ontológica y no en un sentido meramente epistemológico.

3.3. El rol de los valores estéticos en la investigación supramolecular

La investigación científica en general no solo tiene que ver con la producción de nuevos conocimientos, sino también, como ocurre con la ingeniería, con el fin último de desarrollar productos útiles (*cfr*. Schummer, 2003, 2006; Schummer, MacLennan y Taylor, 2009). Por lo tanto, esto hace de la ciencia un escenario propicio para una multitud de valores diferentes, entre los cuales se incluyen los valores estéticos. De modo que intentar comprenderlos forma parte de la comprensión filosófica de la ciencia en general. En este sentido, la química, y en particular, la química de síntesis, resulta un campo de conocimientos de interés para este tipo de análisis dada su posición intermedia entre ciencia y tecnología (Schummer, MacLennan y Taylor, 2009).

Joachim Schummer se propone analizar el valor estético de diversos 'productos químicos' -a los cuales enumera como las sustancias o materiales, las moléculas y los modelos representacionales de moléculas (*cfr*. Schummer, 2003)- y de otros aspectos de la química –como el diseño de objetivos de síntesis química, el diseño y realización de experimentos químicos y el desarrollo de modelos matemáticos (*cfr*. Schummer, MacLennan y Taylor, 2009)-. Observa que el impacto de los valores estéticos no siempre ha resultado productivo con respecto a las metas epistémicas y funcionales. Sin embargo, en campos como la nanoquímica y la química supramolecular, la fascinación estética por las moléculas que se asemejan a objetos ordinarios de la vida cotidiana impulsó las investigaciones para la búsqueda de nuevas sustancias en estas áreas de investigación.

De forma atinada, Schummer (2003) señala que cuando los químicos proclaman la 'belleza' de las moléculas, en verdad, se están refiriendo a sus representaciones, es decir, a los modelos moleculares macroscópicos como los llamados de 'bolas y palillos'

y no a las moléculas en sí. Por ese motivo, Schummer se aboca a analizar el valor estético de los modelos en sí, a los que considera de forma amplia como aquellos objetos perceptibles que son producidos para representar o ilustrar estructuras moleculares y que comprenden imágenes, modelos de palos y bolas, gráficos computacionales, etcétera. Uno de los argumentos principales de Schummer (2003, 2006) es que el potencial estético de determinados modelos moleculares se basa en su capacidad de relacionar contextos semánticos diferentes, para cuyo análisis resulta fértil la teoría semiótica de Umberto Eco para los mensajes estéticos.

En particular, Schummer toma el caso de las representaciones gráficas de moléculas que se asemejan a objetos macroscópicos de uso cotidiano, como un rotor, una canasta, una pelota de fútbol (ver Figura 1).

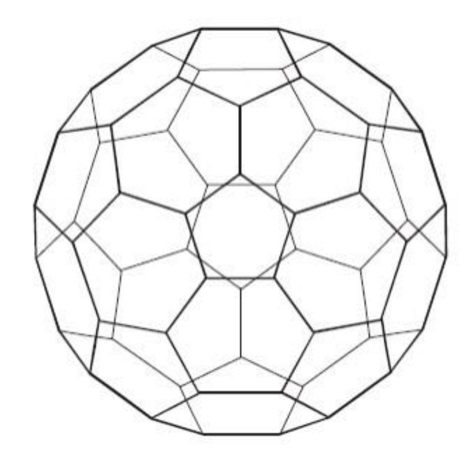


Figura 1. Representación molecular del buckminserfullereno o buckybola, que también representa, para Schummer, una pelota de fútbol (Schummer, 2003, p.94).

Schummer (2003, 2006) afirma que, por ejemplo, el propósito de construir máquinas moleculares -aspecto que tienen en común la química supramolecular y la nanotecnología-, fue inspirado por un fenómeno estético de transformación perceptual (*gestalt switch*) que permitió una nueva forma de interpretar las imágenes moleculares. Esto sucedió debido a la fascinación de los químicos supramoleculares por determinadas imágenes que referían, al mismo tiempo, tanto a moléculas como a objetos cotidianos y, por lo tanto, permitían conectar simbólicamente ambos mundos típicamente desconectados. La visualización de moléculas como objetos cotidianos susceptibles de cumplir otro tipo de funciones condujo a la utilización, hacia finales de los ´90, de un nuevo tipo de imágenes para representar específicamente a los dispositivos

supramoleculares. A este nuevo lenguaje simbólico inspirado en aparatos eléctricos y mecánicos, Schummer (2006) lo denomina ‘representaciones tecnomórficas’, imágenes a las cuales probablemente nadie asociaría a moléculas, dado que están despojadas de cualquier referencia directa a fórmulas químicas o estructuras moleculares. Esto estimuló la imaginación e impulsó las investigaciones para construir nuevas ‘máquinas moleculares’ que imiten objetos cotidianos en tamaño diminuto.

Para el autor, la atracción estética de esas representaciones gráficas se basa en una ‘tensión’ por referirse tanto al mundo químico de las moléculas como al mundo de los objetos cotidianos. La teoría de Eco explica tales tensiones como características de los mensajes estéticos. Esa tensión permite reconsiderar lo que Eco llama el *sistema semántico*, las reglas de referencias y significados de los gráficos moleculares (*cfr*. Schummer, 2006, 2003). Tal desafío puede tener efectos productivos si provoca una reorganización del sistema semántico.

En este sentido, Schummer (2003, 2006) sugiere que la química supramolecular y la nanotecnología son el resultado directo de la ambigüedad productiva de tales representaciones moleculares, por permitir un cambio en la forma en que los químicos ‘ven’ el mundo molecular y de este modo, habilitar la imaginación de una miniaturización del mundo cotidiano. Este cambio fue inducido por la experiencia estética producida por la doble referencia de estos gráficos, lo cual inspiró la integración de nuevos aspectos del mundo cotidiano en el mundo molecular, sintetizando nuevos sistemas supramoleculares.

A diferencia del sistema semántico clásico de la química molecular -en la que la fórmula estructural representa las propiedades químicas del compuesto y las reacciones químicas se representan mediante mecanismos reacción en términos de ruptura y formación de enlaces químicos-, este nuevo sistema semántico de la química supramolecular y la nanotecnología representa a las moléculas como dotadas de nuevas propiedades, no solamente químicas, sino también mecánicas, como por ejemplo, poder albergar sustancias en su interior como una canasta o incluso funcionar como partes de ‘máquinas moleculares’ capaces de reconocerse entre sí, entre otras (*cfr*. Schummer, 2006, 2003).

El análisis que realiza el autor pone de relieve el importante papel que juega la experiencia estética como una fuerza impulsora en la investigación química en general, y en particular en el área de la nanoquímica y la química supramolecular.

3.4. Aspectos éticos de la investigación nanoquímica

El gran desarrollo de la investigación en el campo de la nanoquímica presenta interesantes aristas en la reflexión acerca de los aspectos éticos de la investigación científica y tecnológica. A partir de un análisis epistemológico de las prácticas de la nanotecnología, Alfred Nordmann (2007) enfatiza que estas investigaciones están generando nuevas cuestiones éticas y filosóficas en general. Por ejemplo, el hecho de que objetos como como los nanotubos de carbono se constituyen a través de circunstancias contingentes plantea preguntas difíciles para la evaluación de riesgos y, al mismo tiempo, provoca una nueva relación entre los investigadores y los objetos que producen. Los nano-objetos están tan individualizados por su origen y sus interacciones con el entorno que no pueden ser tratados como representantes de una clase de fenómenos naturales. Por lo tanto, presentan desafíos éticos perdurables frente a un dominio proliferante y ramificado de investigación en el campo 'nano' que no se ajusta a los cánones clásicos de ciencia teórica ni de innovación tecnológica. El autor destaca que es necesario pensar detenidamente sobre las cuestiones éticas que plantea este dominio; no obstante, como las aplicaciones potenciales de los productos de investigación aún parecen lejanas, las discusiones éticas en torno a ellos siguen siendo bastante especulativas (Nordmann, 2007).

Bernadette Besaunde-Vincent y Jonathan Simon (2019) afirman que la norma actual consiste en anticipar y prevenir los efectos adversos de la innovación en la investigación en el campo 'nano', pero este trabajo se enfoca principalmente en la gestión, evaluación de riesgos, estudios prospectivos y medidas preventivas. Sostienen que, aunque adecuado, este tipo de enfoque preventivo no agota la amplia gama de problemáticas éticas del campo. Por ejemplo, resulta relevante considerar que el diseño y producción de nano-objetos nace en la intersección de sistemas heterogéneos de valores, que incluyen valores epistémicos, valores tecnológicos (como control o eficiencia), valores medioambientales, valores sanitarios, valores políticos y económicos. En este sentido, consideran que mientras estos sistemas de valores potencialmente conflictivos impliquen desafíos éticos y políticos es importante la reflexión acerca de cómo las sociedades pueden manejar objetos tan densamente cargados de valores, en un contexto de gran variedad de actores involucrados, diversidad de intereses científicos, industriales y geopolíticos.

Por su parte, Marina Banchetti-Robino (2021) afirma que la tanto la capacidad de manipulación de los nanomateriales de forma segura así como también la evaluación de

su seguridad dependen de tener un acceso epistémico transparente a sus propiedades. Desde una perspectiva de la epistemología fenomenológica, aborda la relación entre humanos y las tecnologías empleadas en dicha manipulación, ya que ello permitiría determinar si los instrumentos son epistémicamente transparentes u opacos, circunstancia que afecta la capacidad de evaluación de la seguridad de los nanomateriales. En particular, su análisis se enfoca en los aspectos éticos y medioambientales implicados en la manufacturación de nanomateriales artificiales, dada su creciente producción y potencial liberación al medio ambiente, que ya son materia de preocupación internacional. La autora considera que las imágenes de las nuevas tecnologías- como por ejemplo el microscopio de efecto túnel- utilizan un enfoque novedoso que parece desafiar la noción tradicional de representar hermenéuticamente el micromundo. En este sentido, las nuevas tecnologías rompen con el enfoque tradicional de 'campo lejano' de los dispositivos de imágenes tradicionales porque la imagen se realiza en modo proximal en lugar de distal.

4. Consideraciones finales

En este trabajo nos hemos propuesto realizar un raconto general de los trabajos que buscaron pensar aspectos de la nanoquímica y la química supramolecular desde una perspectiva filosófica y presentar algunas perspectivas y proyecciones cuya visión desde la filosofía de la ciencia estimamos que resultará relevante. En ese sentido, abordamos consideraciones acerca de la naturaleza ontológica de los objetos particulares del mundo 'nano' y también otros aspectos filosóficos, con aristas epistemológicas, metodológicas, estéticas y éticas elaborados sobre este campo específico.

Consideramos que nuevos problemas surgen y cobran relevancia cuando se emprende el estudio de ambas disciplinas desde una perspectiva filosófica y también que viejos problemas adquieren, o podrían adquirir, nuevas dimensiones, lo que puede exigir reformulaciones o un replanteos, tanto en los aspectos estrictamente científicos o tecnológicos como en las consideraciones filosóficas inherentes a ellos. Esta situación exige abogar por una retroalimentación sinérgica entre las visiones filosóficas y científico-tecnológicas de proyecciones positivas tanto para la comunidad académica como para la población en general.

Las investigaciones en nanoquímica han sido relevantes para la consolidación de algunas subdisciplinas dentro de la química, como la química de superficies o la química biométrica. Es notable que en el Premio Nobel de Química de 2016, otorgado a Jean-

Pierre Sauvage, James Fraser Stoddart y Ben Feringa por el diseño y síntesis de máquinas moleculares, los laureados insistieron en que utilizaron recursos propios de la química, especialmente el empleo de plantillas y recursos de la topología molecular, para el desarrollo de sus investigaciones. Este aspecto, además de resaltar la importancia de la química, invita a reflexionar sobre las relaciones con otras disciplinas relevantes en el nanomundo.

En la actualidad se está produciendo un complejo proceso de convergencia e interacción entre los avances producto de las investigaciones del 'mundo nano', con otros campos de investigación de gran auge y desarrollo, como la biología molecular y biotecnología, las tecnologías de la información y comunicación, y las neurociencias. Los efectos y las repercusiones de esta convergencia interdisciplinar son conjeturales, especulativos y de difícil -o imposible- predicción. En este contexto, la reflexión filosófica específica resulta no solo importante, sino *imprescindible* como complemento necesario para el desarrollo científico.

Referencias bibliográficas

Banchetti-Robino, M. P. (2021). "Phenomenological Epistemology and Nanotechnology: Scanning Tunneling Microscopy as Hermeneutic Technics". En: Llored, J. P. (ed.). *Ethics and Chemistry: A Multidisciplinary Investigation*. London, UK, en preparación.

Bensaude-Vincent, B. y Simon, J. (2019). "Introduction. Nanotechnoscience: The End of the Beginning". *Philosophia Scientiæ* 23: 5-17.

Borges, J. L. (2012). *Cuentos completos*. Buenos Aires: Sudamericana.

Buzea, C., Pacheco, I. y Robbie, K. (2007). "Nanomaterials and nanoparticles: sources and toxicity". *Biointerphases* 2: MR17-MR71.

Cao, G. (2004). *Nanostructure and Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications*. London: Imperial College Press.

Claramunt Vallespi, R.; Farrán Morales, M. y López García, C. (2013). *Química bioorgánica y productos naturales*. Madrid: UNED.

Córdoba M. y Zambon, A. (2017). "How to handle nanomaterials? The re-entry of individuals into the philosophy of chemistry". *Foundations of Chemistry* 19: 185-196.

Cragg, P. J. (2005). *A practical guide to supramolecular chemistry*. Chichester: John Wiley & Sons.

Drexlex, E. (1986) *Engines of Creation. The Coming Era of Nanotechnology*. New York: Anchor Books, Doubleday.

Feynmann, R. (1960). "There´s plenty of room at the botton". *California Institute of Technology, Engineering and Science* 23: 22-36.

Gago, J. (2010). *Nanociencia y nanotecnología. Entre la ciencia ficción del presente y la tecnología del futuro*. Madrid: Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología.

Kanagaraj, K.; Alagesan, M.; Inoue, Y. y Yang, C. (2017). "Solvation Effects in Supramolecular Chemistry". En: Atwood, J. L. (ed.). *Comprehensive Supramolecular Chemistry II Vol.1*. Oxford: Elsevier, pp.11-60.

Lehn, J. M. (1988). "Supramolecular chemistry—scope and perspectives molecules, supermolecules, and molecular devices (Nobel Lecture)". *Angewandte Chemie International Edition in English*, 27: 89-112.

Lewowicz, L. y Lombardi, O. (2013). "Stuff versus individuals". *Foundations of Chemistry* 15: 65-77.

Lombardi, O., y Ferreira Ruiz, M. J. (2019). " Distinguishing between inter-domain and intra-domain emergence". *Foundations of Science* 24: 133-151.

Nordmann, A. (2007). “If and then: A critique of speculative nanoethics”. *Nanoethics* 1: 31-46.

Rao, C. N. R., Müller, A. y Cheetham, A. K. (2004). *The Chemistry of Nanomaterials*. Weinheim: Wiley-VCH.

Schaefer, H. E. (2010). *Nanoscience: the science of the small in physics, engineering, chemistry, biology and medicine*. Berlin: Springer.

Schmid, G. (2004). *Nanoparticles. From theory to application*. Weinheim: Wiley-VCH.

Schummer, J. (2003). “Aesthetics of chemical products”. *HYLE–International Journal for Philosophy of Chemistry* 9: 73-104.

Schummer, J. (2006). “Gestalt switch in molecular image perception: the aesthetic origin of molecular nanotechnology in supramolecular chemistry”. *Foundations of Chemistry* 8: 53-72.

Schummer, J.; MacLennan, B. y Taylor, N. (2009). “Aesthetic values in technology and engineering design”. En: A. Meijers (Ed.), *Philosophy of technology and engineering sciences.* Amsterdam: North-Holland/Elsevier, pp.1031-1068.

Steed, J. y Atwood, J. (2009). *Supramolecular Chemistry* (2º ed.). UK: John Wiley & Sons.

Whitesides, G., Mathias, J. y Seto, C. (1991). “Molecular self-assembly and nanochemistry: a chemical strategy for the synthesis of nanostructures”. *Science* 254: 1312-1319.

Zambon, A., Córdoba, M., y Lombardi, O. (2019). “¿Nanomateriales o nanopartículas? Desafíos de la ontología del dominio nano”. *Mundo Nano. Revista Interdisciplinaria en Nanociencias y Nanotecnología* 12: 1e-9e.

Zambon, A. y Córdoba, M. (2021). “Nanomaterials and Intertheoretical Relations: Macro and Nanochemistry as Emergent Levels”. *Foundations of Science* 26: 355-370.

Zanella, R. (2012). “Metodologías para la síntesis de nanopartículas: controlando forma y tamaño”. *Mundonano* 5: 69-81.

CAPÍTULO 11

Historia de la química, filosofía de la química y didáctica de la química. Una triada virtuosa

Mario Quintanilla-Gatica
Universidad Católica de Chile

1. Introducción

Hace ya 10 años, recibí otra invitación tan desafiante como esta del Dr. José Antonio Chamizo de la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México, para participar de la elaboración del capítulo *La historia de la química y su contribución a una nueva cultura de la enseñanza de las ciencias* que, finalmente se incluyó en su libro *Historia y Filosofía de la Química. Aportes para la Enseñanza* (Chamizo, 2010). Algunos años después, derivado de la sistemática y permanente colaboración de nuestra Red Latinoamericana de Investigación en Didáctica de las Ciencias (REDLAD), se publicó en Chile el libro *Historia y filosofía de la ciencia* (Quintanilla, Daza y Cabrera (2014) que se hace parte de otros dos libros, *La historia de la ciencia en la investigación didáctica* (Quintanilla *et al.*, 2016) e *Historia, Filosofía y Didáctica de las Ciencias: Aportes para la formación del profesorado de ciencias* (Izquierdo *et al.*, 2016)[15] y más recientemente del capítulo *The History and Philosophy of Chemistry (HPC) in Teaching and in the Professional Development of Teachers* (Quintanilla, 2020) que han sido, de alguna manera, la inspiración de esta nuevas reflexiones.

En el primer apartado voy a referirme, desde una visión muy personal, a la vinculación entre historia de la ciencia (HC)[16], filosofía de la ciencia (FC) y didáctica de las ciencias (DC) con la finalidad de explicitar en el espacio que nos da cabida esta publicación, la naturaleza metacientífica de estas disciplinas y del valor de su vinculación

[15] Ambos libros están a disposición de lectores/as y pueden ser descargados directamente desde mi sitio Web www.laboratoriogrecia.cl

[16] En lo sucesivo utilizaré esta notación para referirme a historia de la química (HQ), filosofía de la química (FQ), didáctica de la química (DQ), historia de la ciencia (HC), filosofía de la ciencia (FC) y didáctica de las ciencias (DC).

para la comunidad científica en general y la formación del profesorado de química en particular. En el segundo apartado, me referiré brevemente a algunas de las corrientes filosóficas que nos ayudarán a comprender estas relaciones y sus consecuencias para la enseñanza, la evaluación y el aprendizaje de la química, mismas que desarrollaré en el próximo capítulo de este libro. En el tercer apartado caracterizaré discretamente estas relaciones utilizando como ejemplo la emergencia de la Teoría Atómica de John Dalton. En el apartado cuatro distinguiré a propósito de las reflexiones anteriores, los llamados hechos del pasado de los hechos históricos y, finalmente, en el quinto apartado me referiré a las 'tensiones paradigmáticas entre las visiones absolutistas y constuctivistas de la ciencia'. Vamos a comenzar este camino.

1.1. Historia, Filosofía y Didáctica de las Ciencias. Consideraciones previas

Las ciencias, su enseñanza, su aprendizaje e historia constituyen un rasgo irreducible de la dinámica cultural ayer, hoy y mañana, relacionándose entre sí de múltiples formas y con diversas finalidades. La 'ciencia actual' será la que en algunos años venideros contribuirá a que nuestros estudiantes 'de hoy' se desarrollen como excelentes profesionales, cultos, comprometidos y críticos. Serán los ciudadanos y ciudadanas informados/as que votarán o no por determinados líderes y proyectos de sociedad que determinarán los valores sociales favorables o no a la promoción de la ciencia y la tecnología. Lo que ocurra entonces, formará parte de nuestra historia cultural, de 'nuestro tiempo' y por ello resulta imprescindible y razonable enseñarles a pensar hoy para un mundo que aún está transformándose vertiginosamente, orientando adecuadamente los conocimientos especializados que se derivan de estos tres campos metateóricos: Historia, Filosofía y Didáctica y hacer todo lo posible para articularlos y darles sentido en la enseñanza y el aprendizaje. Si por el contrario, se considera que no es necesario ni relevante saber historia y filosofía de la química para dar clases, nos arriesgamos a una educación que no enseñe para 'el mañana', cuando lo que resulta verdaderamente relevante en la educación es ofrecer al estudiantado un futuro en el que puedan intervenirlo y transformarlo racional y razonablemente (Izquierdo *et al.*, 2007).

Por ello, la DC o la 'ciencia de enseñar ciencias' (Estany e Izquierdo, 1990) demanda la recuperación de la historia y de la filosofía de la ciencia (sin la cual la historia es ciega) para la formación inicial y permanente del profesorado. Desde nuestra mirada,

las ciencias de hoy, su historia intensamente humana, su filosofía siempre controversial y la enseñanza con sus matices culturales no se subordinan unas a otras, sino que han de relacionarse con creatividad e imaginación en la mente 'siempre viva y alerta' del profesorado de ciencias, para orientar con afecto y rigor su labor docente. Sin embargo, estas relaciones nunca han sido sencillas ni fáciles; por el contrario, son complejas y desafiantes y no sólo contribuyen a fundamentar cualquier teoría didáctica, sino que generan nuevas y genuinas preguntas de investigación para otras ciencias. LA HC, la FC y la DC consideran a las ciencias naturales y sociales como objeto de estudio y, aunque las miran con distintas finalidades, comparten con matices, unas mismas influencias de los paradigmas actuales, así como determinados planteamientos, lenguajes y criterios; aunque puedan coexistir en su seno diversas tendencias, confluyen virtuosamente al formar parte de una teoría didáctica y pueden 'mirarse' entre sí; y, a través del profesorado de ciencias, contribuir a que la ciencia (su comunidad de hombres y mujeres) reflexione sobre sí misma, sobre lo que es hoy y lo que podría llegar a ser en el futuro (Izquierdo *et al*., 2007). Voy a hacer entonces un poco de historia.

Han transcurrido ya más de 30 años desde que Estany e Izquierdo (1990) nos advertían sobre los supuestos que subyacen a la dinámica entre la HC y la FC, constituyendo hasta hoy tres décadas después, una cuestión muy debatida y controversial tanto en círculos de filósofos como de historiadores de la ciencia. Comenzaba así, un promisorio camino hacia una articulación virtuosa entre ambas disciplinas que sumaría más tarde a la DC. Las autoras señalaban entonces que *"El problema está en si consideramos la Historia y la Filosofía de la Ciencia como dos disciplinas independientes o bien consideramos que la investigación en uno de estos dos campos (historia o filosofía) implica tener en cuenta la producción teórica del otro. Respecto a esta cuestión podemos encontrar posturas radicales en uno u otro sentido, desde la defensa del 'apriorismo' de las construcciones metateóricas y, por tanto, la absoluta independencia de la Filosofía de la Ciencia respecto a la Historia de la Ciencia, hasta la defensa de la Filosofía de la Ciencia como una mera descripción de las actividades de los científicos. No faltan tampoco posturas intermedias; sin embargo, lo que aquí nos interesa es ver si podemos perfilar una relación entre Historia y Filosofía de la Ciencia que evite tanto el 'apriorismo' como el 'descripcionismo' y que sea la base de una dinámica fructífera entre Historia y Filosofía de la Ciencia"* (Estany e Izquierdo, 1990, p.351). A continuación, veremos que estas destacadas científicas tenían toda la razón.

En las últimas décadas, la HC ha despertado interés creciente en la comunidad de historiadores, filósofos, sociólogos y científicos, y particularmente en los didactólogos como un componente esencial y relevante para repensar la formación inicial y continua del profesorado de ciencias naturales y el aprendizaje, tal y como lo hemos venido planteando en recientes publicaciones (Izquierdo *et al*., 2016; Quintanilla, 2020). Así, se han incrementado sistemática y progresivamente las aportaciones en este ámbito, junto a la celebración de prestigiosos congresos y seminarios internacionales[17] en que se abordan diversos tópicos y dimensiones acerca de la finalidad de la HC como de la FC en la enseñanza y en la formación de profesorado (DC).

La vinculación entre HC-FC-DC se ha estrechado tanto que, actualmente hay una tendencia cada vez más frecuente en la fundamentación teórica de las innovaciones o nuevas propuestas de secuencias de enseñanza y aprendizaje (SEA) basadas en la investigación, particularmente en secundaria, sustentadas en lo que se ha denominado el *constructivismo didáctico* y *didactología* (Estany e Izquierdo, 2001; Izquierdo *et al.*, 2014, 2016; Méheut y Psillos, 2004). En todas estas iniciativas, se ha reconocido y valorado la importancia de 'enseñar a hablar y a escribir ciencias', reconocida y aceptada ahora como una de las principales líneas de investigación en didactología (Candela, 2021).

La HC y la FC proporcionan al profesorado en formación y en ejercicio, recursos importantes para iniciar un diálogo fecundo que se constituye en relaciones metateóricas entre estas disciplinas autónomas (HC, FC y DC). Señalábamos hace algún tiempo, que era relevante considerar que un futuro genuino para *las ciencias* es ya una consecuencia de que la misma se interese 'por su pasado' y una aportación incuestionablemente relevante y prometedora de la HC y la FC a la DC, particularmente a la formación del profesorado de ciencias que aborda estas disciplinas metateóricas, con finalidades muy diferentes a la 'tradición reproductiva' del conocimiento científico. En este sentido una de las grandes dificultades es relacionar la HC con la FC y la DC pues tiene una finalidad educativa que *no forma parte de la propia disciplina histórica y filosófica,* por tanto, se hace necesario justificarla y establecer condiciones en las cuales es legítima, relevante y necesaria para el debate científico y la enseñanza (Boido y Lombardi, 2012; Izquierdo *et al.*, 2014). De esta manera, la comunidad internacional en DC promueve el valor y la

[17] El más importante quizás es el *International History, Philosophy, Sociology Conference* (IHPST) que se celebra cada dos años.

relevancia social de la ciencia, en particular como investigación metateórica. Por su parte, la HC ha tenido una función específica, importante, en la enseñanza de la ciencia (EC), ya que sirve de introducción al profesorado no especialista que se 'aproxima' a ella, mostrando la procedencia y origen del conocimiento científico especializado, cómo se elabora y desarrolla, su relevancia en el marco general de los conocimientos científicos, los retos intelectuales y prácticos a los que se enfrenta la formación del profesorado y sus diferentes, teorías, lenguajes e instrumentos en la producción de conocimiento especializado, así como sus adaptaciones a la enseñanza (Chamizo, 2018; Matthews, 1994; Nieto, 2014).

2. Corrientes filosóficas. Un recorrido histórico

La pregunta central que nos hacemos es ¿cuáles son las limitaciones, complejidades (y dificultades) que el rigor científico impone a al didactólogo o al profesorado de ciencias cuando se aventura en una disciplina en la cual no se ha formado teóricamente y que utilizará en su beneficio y el de su estudiantado? En la Tabla 1 presento una síntesis discreta muy personal (seguro incompleta e inacabada) de las corrientes filosóficas que han contribuido a la reconfiguración del conocimiento y la epistemología de las ciencias, con la finalidad de comprender el desarrollo de las relaciones metateóricas FC-HC-DC que profundizaré más adelante y que se pueden apreciar en la Tabla 1**.**

<table>
<tr><th>Filosofía de la Ciencia</th><th colspan="2">Corrientes</th><th>Pensadores/as destacados/as</th><th>Período aproximado</th><th>Relaciones meta teóricas HC – FC – DC</th></tr>
<tr><td rowspan="2">Absolutismo</td><td colspan="2">Racionalismo</td><td>Platón, Descartes, Kant</td><td>S.XVI - 1960</td><td rowspan="2">Inexistente</td></tr>
<tr><td colspan="2">Empirismo
Positivismo</td><td>Bacon, Looke, Comte, Hume</td><td>S. V - XVIII</td></tr>
<tr><td rowspan="3">Constructivismo</td><td colspan="2">Irracional</td><td>Feyerabend, Khun</td><td>1960-1970</td><td rowspan="2">Transición
FC - HC</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Racional</td><td>Fuerte</td><td>Popper, Lakatos Laudan</td><td>1950 - 1980</td></tr>
<tr><td>Moderado</td><td>Toulmin, Giere, Izquierdo, Solsona, Chamizo, Adúriz-Bravo</td><td>1980 - ……</td><td>Consolidación
Profundización</td></tr>
</table>

Tabla 1**.** Corrientes teóricas en FC y su paulatino acercamiento a la HC en tres momentos. Las relaciones con la DC se desarrollarán a partir del *constructivismo didáctico* en los años 90 (Fuente: elaboración propia)

La HQ referida al trabajo real de cómo se han explicado los diferentes ’fenómenos experimentales’ a través del continuo desarrollo del conocimiento en el devenir de la humanidad, es complejo de describir para una población amplia y, más aún, de enseñar y aprender para una audiencia específica. Su justificación se ve muy compleja y difícil y, en ocasiones, un desafío notable para el profesorado y la comunidad científica. Si decimos a nuestros estudiantes que los átomos y los elementos ‘existen’ ¿Cómo lo demostramos? ¿Cómo demuestro su estructura, sus propiedades? ¿Sus diferencias y similitudes? (Bensaude y Stengers, 1997; Labarca, Zambon y Quintanilla, 2014). Aquí tenemos ejemplos clarísimos de cómo ‘funcionan’ y se comunica la comunidad científica al configurar y reconfigurar las teorías que les son inherentes. Una frase del filósofo Lakatos (1983) publicada en uno de sus célebres libros, nos permite comprender mejor este problema. Señala que La *filosofía de la ciencia sin la historia es vacía.* ¿Qué quiere decirnos con esta hermosa metáfora? ¿De qué habla la FQ si no se fija en el trabajo real que hacen los químicos? No habla de nada. ¿Por qué? ¿Está captando algo esencial del conocimiento científico, *independiente* del trabajo de los y las químicos y químicas? La respuesta es negativa. No hay reglas del conocimiento formal, independiente del trabajo experimental que desarrollan los científicos. Aquí está el contrapunto según Lakatos, *La historia sin la filosofía es ciega*. No sabría ‘ver nada’ del trabajo que hacen los científicos, ya que necesita una reflexión amplia, compleja y coherente con base en la evidencia del trabajo experimental, para derivar luego en ideas generales sobre la construcción del conocimiento.

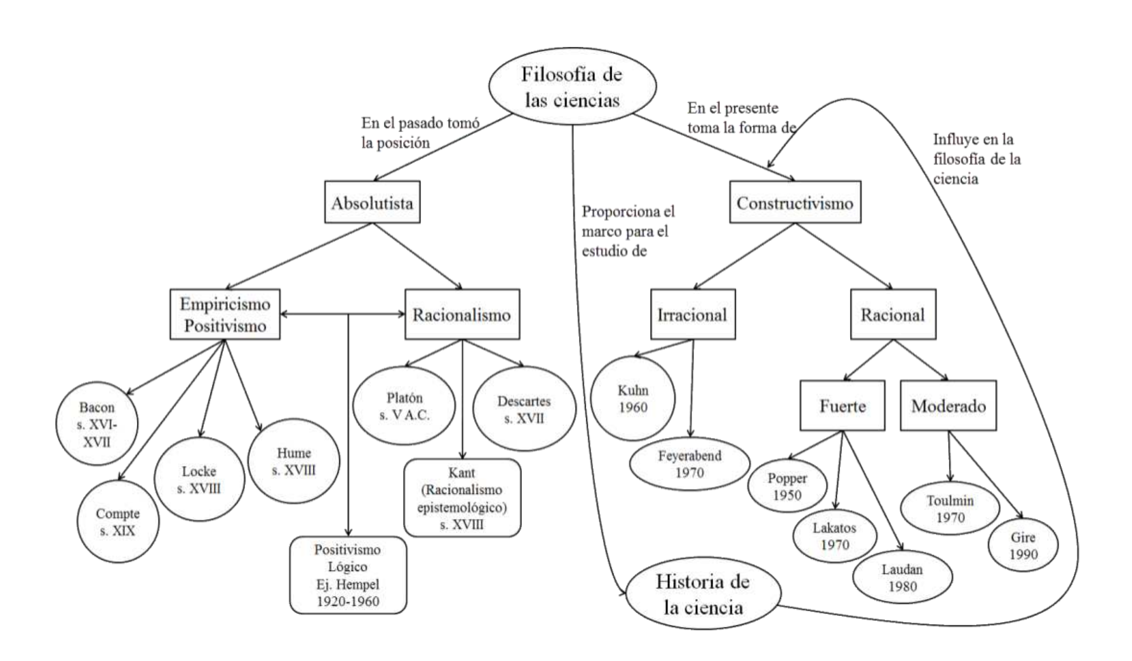


Fig.1. ¿Cómo se construyen los conocimientos científicos? Relaciones entre la historia y la filosofía de la ciencia (Izquierdo, 1995; Quintanilla *et al.*, 2020).

3. Relaciones HQ, FQ y DQ

Lo que he señalado anteriormente, resulta particularmente interesante para la enseñanza de la química y la promoción de competencias de pensamiento científico de nivel superior tales como la argumentación y la explicación, que, por excelencia permiten comprender las teorías, instrumentos y lenguajes propios de la química y su enseñanza (Chamizo, 2018; Quintanilla, Daza y Cabrera, 2014; Quintanilla, Cabrera y Zambrano, 2022).

En definitiva, en el aprendizaje de *contenidos conceptuales* (teoría ácido-base, ley de conservación de la masa, cambio químico, reactivo limitante, estequiometria, por ejemplo) y *procedimentales* (medir la cantidad de una sustancia, pesar un sólido, calcular la concentración de un ácido) la invitación es a comprender las relaciones 'posibles' entre *la historia de la química, la filosofía de la química y la didáctica de la química* para explicarlos de manera genuina y convincente a nuestro estudiantado. Así, se hace necesario recuperar esta idea de Lakatos para proponernos una nueva enseñanza de la química (NEQ) o química escolar (QE) que acepte estas relaciones como consignas y que nos parece prometedora para articularlas con la promoción y desarrollo de competencias argumentativas y explicativas acerca de la química.

Por otra parte, Kragh (2007) nos entrega orientaciones valiosas que contribuyen a comprender cada vez más las relaciones fecundas HQ-FQ-DQ a partir de los estudios sobre la historiografía de las ciencias. Señala que la primera cuestión a considerar en este ámbito, es el *significado teórico y la finalidad* del término historia. Como en ningún caso es posible la *observación directa del pasado* ni acceder por completo a lo que fue (tampoco podemos hacerlo por completo con lo que ocurre en nuestra propia época), puesto que no existe una *historia totalmente objetiva*[18]. Ello implica que la idea de historicidad de la química, admite siempre interpretaciones disonantes en la comunidad científica: algunas de ellas intentan explicar las *transformaciones, progresos y avances* del conocimiento químico desde una mirada *reduccionista y anacrónica* (mirar el pasado con ojos del presente) o bien una visión *diacrónica y recurrente* (mirar el pasado con ojos

[18] Aun cuando la noción de objetividad es compleja, no pretendo desarrollarla en este capítulo.

del pasado). Veamos un ejemplo a propósito de la emergente Teoría Atómica[19], con un extracto del libro *Dalton el hombre que pesó los átomos* (Pellón, 2003), y, que nos permitirá distinguir ambas 'miradas de la HQ y sus consecuencias para 'explicar y argumentar' en la química escolar (QE):

> *La primera conferencia sobre temas de química que impartió Dalton está fechada, según sus historiadores, en Kendal, en 1791. Para entonces, Lavoisier (1770, 1775) ha leído ante la Academia de Ciencias de París una memoria sobre la naturaleza del agua y la imposibilidad de convertirse en tierra, ha rechazado la teoría del flogisto y generalizado la ley de conservación de la masa. Por su parte, los químicos ingleses han desarrollado la química neumática, impulsándose así la química cuantitativa a la que Dalton se dedicará preferentemente. En Alemania, los químicos liderados por Wenzel (1740-1793) analizan la composición de varias sales, cuyos datos finalmente son tabulados y organizados expresándose las cantidades de ácido, base y agua utilizada en la formación de cada una de ellas. Sin embargo, estos datos no resultaban de gran exactitud debido fundamentalmente a la carencia de instrumentos de precisión en aquella época. Por su parte Benjamín Richter (1762 – 1807) en 1792 con su tesis doctoral pretendía introducir las matemáticas a la química, surgiendo de esta manera la estequiometria cuyo propósito era medir las proporciones cuantitativas de los elementos químicos que interactuaban en las reacciones químicas, es decir, que buscaba las relaciones aritméticas de la química.En 1792, a pocos años de la instauración de la República de Francia, Dalton continúa investigando sobre el comportamiento de los gases, desarrollando la idea de que la tendencia de los fluidos elásticos a través de otros se produce básicamente debido a una supuesta repulsión entre dichas partículas al existir una atmósfera de calor diferente alrededor de cada fluido. El interés de Dalton, según Pellón (2003), en la solubilidad de los gases no está en "el proceso químico", sino en el mecanismo por el que los gases se disuelven, para lo cual su idea es calcular los pesos relativos de las partículas últimas de los distintos gases. Después de múltiples ensayos y anotaciones que irá rectificando y completando en el desarrollo de sus ideas, en su cuaderno de*

[19] Profundizo este ejemplo y las relaciones entre HQ, FQ y DQ en Quintanilla, Cuellar y Cabrera (2014).

notas de 1803 escribe, entre otras, las siguientes ideas: i). Los átomos son indivisibles y no pueden ser creados ni destruidos, ii) Los átomos de diferentes elementos tienen distintas masas. iii) Todos los átomos de un elemento dado son idénticos y tienen la misma masa invariable. iv) La masa de la partícula de un compuesto es la suma de sus átomos constituyentes. v) La partícula de un compuesto está formada por un número fijo de átomos. Las afirmaciones anteriores son completadas por Dalton en septiembre y octubre de 1803 y no se modificarán más en sus ensayos y conferencias posteriores (Pellón, 2003, pp.38-41).

Vemos en este breve extracto de la vida y obra de Dalton cómo se puede comprender el surgimiento de su modelo[20] atómico, a partir de los años dedicados al estudio de los gases y el *mecanismo* de cómo se combinan para formar 'otras sustancias'. Su descubrimiento más importante es la ley de las presiones parciales; según la cual, la presión ejercida por una mezcla de gases es igual a la suma de las presiones de cada gas por separado, (cada uno de ellos ocupando el mismo volumen que la mezcla); que junto a sus estudios de las propiedades físicas del aire atmosférico y otros gases, le llevaron a la conclusión de que la materia está formada por átomos de diferentes masas, que se combinan para formar compuestos y que hoy conocemos como 'teoría atómica de la materia o modelo atómico de Dalton' (Pellón, 2003). ¡Un análisis histórico interesante para mirar con ojos del pasado, 'las preguntas' que orientaron *su mirada* primero en los fenómenos macroscópicos y luego cómo teorizó de manera admirable hasta configurar su modelo de átomo y que en nuestras escuelas y universidades, normalmente se enseña primero de manera anacrónica y luego, sólo enfatizando el *producto* de su teoría!

4. Los hechos del pasado versus los hechos históricos 'en la ciencia'

Esta forma de entender la HQ (visión diacrónica), valiosa a nuestro juicio para la formación inicial y continua del profesorado de química, genera planteamientos que distinguen de manera sustancial los llamados *hechos del pasado y los hechos históricos* (Izquierdo *et al.*, 2014; Kragh, 2007), muy diferente a enseñar la química como objeto o producto del conocimiento acabado y ahistórico ¡como si el conocimiento emergiera de

[20] La palabra 'modelo' y 'teoría', así como 'modelos teóricos' se utilizan en este capítulo con la idea de 'correspondencia y similitud' que orienta la filosofía cognitiva y la investigación en DQ que acepta muchas acepciones, algunas de ellas polémicas. No es mi propósito discutirlos o distinguirlos aun cuando esta aclaración podría resultar, insuficiente, convencional o controversial.

improviso! Kragh indica que la *historiografía diacrónica* estricta es un simplemente un ideal, puesto que el/la historiador(a) no puede liberarse totalmente de su tiempo ni evitar completamente el empleo de modelos o patrones contemporáneos que ha aprendido a valorar y promover. Aún más, una historia estrictamente diacrónica no tendría ningún interés para el profesorado y muy poco para la DC. Sin embargo, es evidente que una historia anacrónica de la química no sólo es falsa, sino que podría utilizarse para sustentar toda clase de retóricas (de progreso constante de la ciencia, de exclusión o no de las mujeres, de disputas entre ciencia y religión; ciencia y política; de progresos constantes) en lugar de favorecer una reconstrucción serena, razonable y documentada de los datos, y un reconocimiento de la falta de ellos, cuando corresponda (Izquierdo *et al.*, 2014). ¿Qué hacer entonces en la clase de química, para no presentar el presente como consecuencia directa del pasado, pero, a pesar de ello, poder vincularlo de alguna manera al presente, en interés de la formación científica del alumnado, promoviendo pensamiento competencial de nivel superior utilizando la HC y la FC para desarrollarlo? (Camacho y Quintanilla, 2008; Quintanilla *et al.*, 2016).

La perspectiva de HQ que desconoce, subestima, desprecia u omite determinado tipo de fuentes (primarias y secundarias) e interpreta sin valorar el sentido que tienen (o tuvieron) en una determinada época, las expectativas socioculturales, disputas ideológicas, filosóficas y los conflictos político-religiosos, que condicionaron los descubrimientos e invenciones científicas, elementos todos que también forman parte del llamado *dato histórico*, contribuye a una interpretación restrictiva y reduccionista del proceso de construcción del conocimiento y la actividad científica que, para muchos investigadores, no sería la más adecuada, ni suficiente para comprender el mundo a través de la educación científica en general y de la química en particular que enseñamos en nuestros países.

Insistimos en comprender y valorar la relación HQ-FQ a partir de la dinámica y sinergia propia del conocimiento científico, de que lo que aprendemos y enseñamos 'está vivo', que las teorías, instrumentos y lenguajes de la química transitan y cambian permanentemente en un fructífero *diálogo y reflexión* dinámica entre el mundo microscópico y macroscópico, lo que sumado a las emociones, creatividad e imaginación de hombres y mujeres permiten que la ciencia se reconstruya permanentemente.

Este 'cambio' según las corrientes 'moderadas' como veremos en el próximo apartado, no es radical, sino que paulatino y sistemático. Toulmin (1977) nos señalaba hace ya cuatro décadas que la actividad científica es *progresivamente mutable*, que los

conceptos, modelos y teorías científicas terminan siendo sustituidos por otros, y que los marcos ideológicos que fundamentan el conocimiento en cada época sufren igualmente un proceso de *cambio conceptual o paradigmático natural*, sistemático, continuo e irreversible, que puede ser comprendido a la luz de ciertos principios teóricos y caracterizado con criterios metodológicos específicos que le dan sentido y valor al conocimiento.

5. Desde las visiones absolutistas a las visiones constructivistas de la ciencia

Como apreciamos en la Figura 1, la relación entre FC e HC que se reconoce y profundiza a partir de la década del 70 (Kuhn, 1972; Lakatos, 1983; Toulmin, 1977) es lo que da origen a las *teorías actuales de ciencia en general y de la química en particular*. Se construyen y reconfiguran una serie de *modelos de ciencia* en los cuales ya no interesa solamente la *justificación del conocimiento*, sino que se habla también de *cómo se descubre.* Hasta la década del 70, la FC sostenía fundamentalmente que *el descubrimiento* no se podía abordar ni comprender desde sus argumentos y que, en definitiva, correspondía a la psicología preocuparse expresamente de ese ámbito. Transcurridas cinco décadas, sabemos con demasiados argumentos a favor que no es así. En lo que nos compete, la FC con ayuda de la HC comenzó a diseñar, proponer y validar *modelos de descubrimiento científico* con nuevas y prometedoras finalidades (Barona, 1994; Chalmers, 1993; Estany, 1993). El resultado de esta *nueva etapa de las ciencias* en el que se reconoce el valor de las relaciones entre la FC y la HC, es la superación de los modelos de ciencia absolutistas o categóricos, tales como el empirismo, el positivismo y el racionalismo radical de fines del siglo 19. Los nuevos enfoques, han recibido el nombre de *modelos constructivistas* y consideran los aspectos de justificación y descubrimiento del *saber químico,* desde una visión *irracional o racional* con la finalidad de establecer 'relaciones dinámicas entre ellas' y que ilustré anteriormente.

Por otra parte, es necesario, desde la didáctica de la química (DQ) aclarar brevemente las afirmaciones anteriores, ya que la diferencia o distinción entre descubrimiento y justificación de conocimiento en química, podría resultar ambigua para profesores y estudiantes. Izquierdo y Aliberas (2004) plantean que los procesos que sigue el estudiantado para aprender química y el profesorado para enseñarla, no pueden ser diferentes de los procesos que se siguen para justificarla en términos históricos y

filosóficos, ya que una y otra son relevantes para aprender a 'pensar la química' desde una visión no solamente instrumental u operativa sino también desde una perspectiva cultural y social, promotora de competencias de pensamiento científico. Señalan que una de las complicaciones que surge en los libros de texto, es la utilización de lenguajes que el estudiantado no logra comprender o no le resultan convincentes, aunque, por ejemplo calculen la masa de un soluto, midan el volumen de un ácido, diferencien los signos + y – de un anión o de un catión, o reconozcan los elementos en los 'grupos o períodos' de la Tabla Periódica, sin preocuparse de explicar o argumentar la naturaleza del conocimiento químico que están aprendiendo, así como sus controversias históricas y filosóficas (Labarca, Quintanilla y Izquierdo, 2022a, b), siendo los mismos lenguajes y argumentaciones formales, útiles en la comunicación científica de los/las 'expertos/as químicos/as' (Bensaude y Stengers, 1997).

Así, la historia de la química y la filosofía de la química promueven una mejor comprensión de las nociones teóricas, lenguajes y métodos científicos; los diferentes enfoques históricos o corrientes que se han sistematizado en los últimos años conectan y evalúan adecuadamente el desarrollo del pensamiento individual con el desarrollo de las ideas científicas en momentos y circunstancias particularmente interesantes y complejos de la historia humana (Quintanilla, Daza y Cabrera, 2014). Consideramos además que la historia de la química y la filosofía de la química son necesarias y útiles para comprender la naturaleza de la ciencia y cuestionan con argumentos potentes, el cientificismo y dogmatismo que todavía es común encontrar en nuestras clases y textos habituales de enseñanza de la química secundaria y universitaria. Autores como Gallego y Gallego (2007) sostienen que las relaciones internas entre Historia, Filosofía de la Ciencia y Didáctica de las Ciencias son dialécticas, y la variación o cambio de perspectiva de una de estas metadisciplinas llevaría al replanteamiento de los fundamentos con que se discuten dichas relaciones. Al examinar con prolijidad e intencionalidad epistemológica la vida y épocas de científicos(as), la historia de la química 'humaniza' los contenidos propios de la ciencia que se divulga y enseña. 'Emocionan' los episodios 'desconocidos, evadidos, omitidos u olvidados, acaso intencionadamente. Generan 'identidades' que reconfiguran sentidos y significados en los cuales 'sentimientos, afectos y lenguajes' reconocen en las individualidades y talentos nuestras propias limitaciones, esperanzas y sueños de un mundo mejor. Finalmente, la historia de la química nos permite conectar la ciencia específica con tópicos y temas relevantes de cada disciplina, tales como los de género y también con otros saberes simples o complejos, siempre inacabados e

incompletos, integrando la natural interdependencia del conocimiento humano de una manera compleja, heurística y a la vez, más valiosa para el desarrollo del pensamiento, más interesante para la enseñanza y el aprendizaje de la ciencia (Lires *et al.*, 2002; Solsona *et al.*, 2019).

En consecuencia, una de las tareas prioritarias de la DQ ha de ser promover e introducir estas relaciones HQ-FQ en la formación del profesorado y en la clase de química, con la finalidad de enseñarle al estudiantado la complejidad de su lenguaje, promoviendo un proceso de aprendizaje que implica desarrollar el pensamiento científico, es decir comprender qué es la ciencia y cómo se elabora y el pensamiento químico en particular', qué es la química y cuáles son sus finalidades (Chalmers, 1993; Chamizo, 2018), para lo cual se hace necesario enseñar a hablarla y a escribirla, identificando y caracterizando este lenguaje propio de la disciplina y que pueda posteriormente axiomatizarlo con la lógica formal, utilizando incluso sus propias palabras, aunque al principio sean simples o poco coherentes desde la comunidad química. Con estas orientaciones la química le resultará una ciencia valiosa de aprender que nos explica el mundo, para intervenirlo y transformarlo (Izquierdo *et al.*, 2016).

6. Reflexiones finales

La historia y filosofía de las ciencias nos proporcionan recursos importantes para iniciar un diálogo fecundo e interesante de abordar desde la ciencia escolar, ofreciendo narraciones e historias que introducen a los estudiantes en una actividad científica llevada a cabo por personas “reales”, con sus propias motivaciones y expectativas; que vivieron situaciones políticas y sociales concretas que influyeron en su trabajo; y también para alimentarlo y ofrecerle modelos, puesto que la discusión y el convencimiento del oponente forma parte intrínseca de esa actividad científica (Bonet, 2005). Con estas ideas esclareceremos la historia de la ciencia que es necesaria y desafiante para la formación de profesores, pero consideramos que cuando esto se concrete en las acciones docentes reales del trabajo de aula fundamentadas en la historia de la ciencia, es necesario hablar de un trabajo desde diferentes disciplinas que confluyen en torno a dicha acción. Por eso hablamos de multidisciplinariedad, ya que requieren la colaboración de los profesores de diferentes disciplinas (física, geología, biología, química, historia, lengua, etc.) y, además, de la historia de la ciencia. Su coordinación pertenece a la didáctica de las ciencias, ya que potencia la creación de islotes de racionalidad, en el sentido en que las

disciplinas *se ponen de acuerdo* en contenidos y procesos para generar mejores aprendizajes contextualizados educativamente (Izquierdo *et al.*, 2016).

A continuación, en el próximo capítulo, y sólo con la finalidad de insistir en la idea original de las relaciones HQ-FQ-DQ, me referiré a cómo aproximarnos a ellas para mejorar la calidad de la enseñanza y el aprendizaje de la química, incorporando algunas propuestas que pueden ser interesantes para la formación inicial y continua del profesorado de química.

Referencias bibliográficas

Barona, J. (1994). *Ciencia e historia. Debates y tendencias en la historiografía de la ciencia*. Guada: Valencia.

Bensaude, B. y Stengers, I. (1997). *Historia de la Química.* Madrid: Addison-Wesley.

Boido, G., y Lombardi, O. (2012). "Las relaciones entre la historia y la filosofía de la ciencia (Primera parte)". *Exactamente* (49): 39.

Camacho, J. y Quintanilla, M. (2008). "Resolución de problemas científicos desde la historia de la ciencia: retos y desafíos para promover competencias cognitivo lingüísticas en la química escolar". *Ciência & Educação* 14: 197-212.

Candela, A. (2021). "Interacción discursiva y construcción de la ciencia en el aula". En: Quintanilla, M. y Adúriz-Bravo, A. (Eds.). *Enseñanza de las ciencias para una nueva cultura docente. Desafíos y oportunidades.* Ediciones Universidad Católica, Santiago de Chile, pp.67-84.

Chalmers, A. (1993). *¿Qué es esa cosa llamada ciencia?*. Madrid: Siglo XXI.

Chamizo, J. A. (2010). *Historia y Filosofía de la Química. Aportes para la Enseñanza.* México: Siglo XXI.

Chamizo, J. A. (2018). *Química General. Una aproximación histórica*. México: Ediciones UNAM.

Estany, A. (1993). *Modelos de cambio científico.* Barcelona: Editorial Crítica.

Estany, A.; Izquierdo, M. (1990). "La evolución del concepto de afinidad analizada desde el modelo de S. Toulmin". *Llull* 13: 349-378.

Estany, A.; Izquierdo, M. (2001). "La didactología: una ciencia del diseño". *Endoxa* 14: 13-34.

Gallego Badillo, R. y Gallego Torres, A. P. (2007). "Historia, Epistemología y Didáctica de las Ciencias: Unas Relaciones Necesarias". *Ciência & Educação (Bauru)* 13: 85-98.

Izquierdo, M. (1995). "*La enseñanza de conceptos científicos a partir de la experimentación escolar, Relación entre la historia de las ciencias y la didáctica de las ciencias"*, Barcelona: Departamento de Didáctica de las Ciencias Especiales, Universidad Autónoma de Barcelona.

Izquierdo, M. y Aliberas, J. (2004). *Pensar, actuar i parlar a la classe de ciències*. Barcelona: Universidad Autónoma de Barcelona.

Izquierdo, M.; Quintanilla, M.; Vallverdú, J. y Merino. C. (2014). "Una nueva reflexión sobre la historia y filosofía de las ciencias y la enseñanza de las ciencias". En: Quintanilla, M.; Daza, S. y Cabrera Castillo, H. G. (eds.). *Historia y Filosofía de las Ciencias. Aportes para una 'nueva aula de ciencias', promotora de ciudadanía y valores*. Bellaterra: Santiago de Chile, pp.30-51.

Izquierdo, M.; García Martínez, A.; Quintanilla Gatica, M. y Adúriz-Bravo, A. (2016). *Historia, Filosofía y Didáctica de las Ciencias: Aportes para la formación del profesorado de ciencias*. Universidad Distrital Francisco José de Caldas: Bogotá.

Kragh, H. (2007). *Introducción a la historia de la ciencia.* Crítica: Barcelona.

Kuhn, T. (1972). *La estructura de las revoluciones científicas.* Madrid: Fondo de Cultura Económica.

Labarca, M.; Zambon, A. y Quintanilla, M. (2014). "Aspectos histórico-filosóficos del concepto de 'elemento'. Aportes para la formación inicial y continua del profesorado de ciencias". En: Quintanilla, M.; Daza, S. y Cabrera Castillo, H. G. (eds.), *Historia y Filosofía de las Ciencias. Aportes para una 'nueva aula de ciencias', promotora de ciudadanía y valores*. Bellaterra: Santiago de Chile, pp.233-249.

Labarca, M.; Quintanilla, M. y Izquierdo, M. (2022a). “El problema del grupo 3 de la tabla periódica: su enseñanza mediante la argumentación y la explicación científica. Primera parte”. *Ciência & Educação (Bauru)* 28, e22013: 1-13.

Labarca, M.; Quintanilla, M. y Izquierdo, M. (2022b). “El problema del grupo 3 de la tabla periódica: su enseñanza mediante la argumentación y la explicación científica. Segunda parte”. *Ciência & Educação (Bauru)* 28, e22014: 1-12.

Lakatos, I. (1983). *La metodología de los programas de investigación científica*. Madrid: Alianza Editorial.

Lires, M.; Nuño, T. y Solsona, N. (2002). *Las científicas y su historia en el aula*. Madrid: Editorial Sintes.

Matthews, M. (1994). *Science Teaching: The Role of History and Philosophy of Science*. Nueva York: Routledge.

Méheut, M. y Psillos, D. (2004). “Teaching-learning sequences: aims and tools for science education research”. *International Journal of Science Education* 26: 515-535.

Nieto, A. (2014). “Las ‘historias de la ciencia’ y sus adaptaciones a la enseñanza: Un debate abierto”. En: Quintanilla, M.; Daza, S. y Cabrera Castillo, H. G. (eds.). *Historia y Filosofía de las Ciencias. Aportes para una ‘nueva aula de ciencias’, promotora de ciudadanía y valores*. Bellaterra: Santiago de Chile, pp.66-76.

Pellón, I. (2003). *El hombre que pesó los átomos.* España: *Dalton*, Nivola:.

Quintanilla, M. (2020). “The History and Philosophy of Chemistry (HPC) in Teaching and in the Professional Development of Teachers”. En: El-Hani, C.; Pietrocola, M.; Mortimer, E. F. y Otero, M. R. (eds.), *Science Education Research in Latin America. Cultural and Historical Perspectives on Science Education*: Handbooks, Volume 22/7, Leiden: The Netherlands, pp.457-480.

Quintanilla, M., Cuellar, L. y Cabrera, H. (2014). “Una visión naturalizada de la historia de la química. El caso del modelo atómico de John Dalton”, En: Quintanilla, M.; Daza, S. y Cabrera Castillo, H. G. (eds.), *Historia y Filosofía de la Ciencia*. Bellaterra: Santiago de Chile, pp.216-231.

Quintanilla, M., Daza, S. y Cabrera, H. (2014). *Historia y filosofía de la ciencia*. Santiago de Chile: Bellaterra.

Quintanilla, M.; Solsona, N.; García, A. y Alvarez, M. (2014). “Uso de la historia de la química como dispositivo teórico y praxeológico para promover competencias de pensamiento científico”. En: Quintanilla, M. (Comp.), *Las competencias de pensamiento científico desde las emociones, sonidos y voces del aula*. Santiago de Chile: Bellaterra, pp.53-96.

Quintanilla, M. (Comp.); Agudelo, C.; Cabrera, H.; Cerquera, M.; Cuellar, L.; García, E.; Garrido, C; Hernández, G.; Godoy, O.; González, L.; Joglar, C.; Solsona, N. (2016). *La historia de la ciencia en la investigación didáctica.* Santiago de Chile: Bellaterra.

Quintanilla, M.; Orellana, C., Páez, R. (2020). “Representaciones epistemológicas sobre competencias de pensamiento científico de educadoras de párvulos en formación”. *Enseñanza de las Ciencias* 38: 47-66.

Quintanilla, M. R.; Cabrera Castillo, H. G. y Zambrano, J. (2022). “La historia y la filosofía de la química en la formación inicial del profesorado de química”. *Educación Química* 33: 192-205.

Solsona, N.; Quintanilla, M. y Ariza, Y. (2019). “Filosofía de la ciencia, historia de la ciencia y didáctica de las ciencias: perspectivas teóricas actuales y la emergencia de los temas de género en la formación del profesorado”. *Actes de XVII Jornades sobre la història de la ciència i l’ensenyament*, Barcelona.

Toulmin, S. (1977). *La comprensión humana.* Madrid: Alianza Universidad.

CAPÍTULO 12

Racionalismo categórico y racionalismo moderado. Perspectivas, contradicciones y propuestas para la formación del profesorado y la enseñanza de la química

Mario Quintanilla-Gatica
Universidad Católica de Chile

1. Introducción

En el capítulo anterior presenté y discutí de manera discreta, algunos aspectos teórico-conceptuales y prácticos, acerca del sentido y relevancia de las relaciones posibles entre la historia de la química, la filosofía de la química y la didáctica de la química. En este capítulo profundizaré en estas perspectivas. En el primer apartado analizaré las tensiones teóricas entre racionalismo y empirismo comentando algunas polémicas para la enseñanza de la química. En el segundo apartado, analizo las principales ideas del constructivismo irracional con las mismas finalidades que me parecen interesantes para el profesorado. En el tercer apartado dedicaré la mayor extensión de este capítulo a desarrollar y profundizar en los postulados del racionalismo hipotético que derivan en el constructivismo moderado y sus contribuciones a la enseñanza de la química. Finalmente en el apartado cuatro comparto algunas propuestas que hemos venido adelantando en mi grupo de investigación y que me parecen útiles y necesarias para vincular la historia de la química, la filosofía de la química y la didáctica de la química como una tríada virtuosa en la formación del profesorado, la enseñanza y el aprendizaje de la química.

1.1. Racionalismo categórico, empirismo y enseñanza de la química

Esta corriente de pensamiento filosófico se sitúa en el plano de la justificación del conocimiento científico y no le interesa cómo se genera. En la construcción o reconstrucción de sus teorías seleccionan claramente los 'términos o conceptos experimentales' de los 'conceptos teóricos'. Los *empiristas positivistas* parten de la experimentación pensando que a partir de ellas se llegan a configurar las diferentes

teorías. Otro grupo de científicos más radicales, en el empirismo más estricto, piensa que se puede prescindir de las teorías, fortaleciendo la idea de que se relacionan los hechos experimentales entre ellos, pero no las teorías entre sí (Chalmers, 1993). El Círculo de Viena (cuna del positivismo lógico en las primeras décadas del siglo XX) postula el *empirismo lógico* que expresa la confluencia de dos tradiciones anteriores: el *empirismo,* en tanto que los juicios de la comunidad científica no pueden tener otro fundamento que la experiencia, y el *racionalismo categórico* que establece la necesidad de producir conocimiento dentro de los límites de la lógica formal 'heredada de las matemáticas'. Para los 'químicos racionalistas', la distinción entre *química y no química* es bien clara: Su carácter 'científico' se atribuye a tomar decisiones, rigiéndose solamente por el criterio de racionalidad (Bachelard, 1989).

En términos generales, los empiristas lógicos, plantean un análisis sincrónico del hecho científico, centrado en un momento concreto y específico de la historia de la comunidad científica, muy puntual y en consecuencia *sin carácter evolutivo*. ¿Acaso no es esta química la que enseñamos a nuestros estudiantes normativa e instrumental sin una visión de la HQ y la FQ? Las teorías concebidas así son muy rígidas, acentuando la articulación lógica del saber químico mediante el énfasis en un lenguaje formalizado propio de las matemáticas (calcular la cantidad de solvente, medir el volumen de un ácido, equilibrar na reacción química o identificar los elementos en la tabla periódica). En este sentido, la confianza en la matemática es una constante en la Historia y también en la enseñanza de las Ciencias. Desde Pitágoras hasta Platón existe una confianza permanente *en el número* para tratar de explicar y representar el mundo y con ello, darle sentido a la vida y una explicación al origen de las cosas. ¡Sabemos que la química no se describe, justifica, explica o argumenta sólo con números!

Los resultados del empirismo lógico se transforman en una especie de *concepción heredada* con la cual se comienza de manera muy seria a tratar de *explicar y justificar* la ciencia (Popper, 1995). Comienza así un intento muy serio por explicar el conocimiento científico de una manera diferente. Se trata de construir una *lógica especial*, sobre la base de la que se desarrolla a partir de la segunda mitad del siglo XIX, diferente a la lógica aristotélica. En esta época, tiene su auge y consolidación, la *lógica matemática*, lo que explicaría, en nuestro caso, el énfasis persistente de la matemática en la enseñanza y el aprendizaje de la química, es decir, que haya una conexión entre los términos teóricos y empíricos de manera absolutamente trabada, tal que cada uno quede relacionado

perfectamente a través de un lenguaje sin ambigüedades, similar al lenguaje matemático ¡La ausencia de esta lógica matemática es inadmisible en la clase de química según los racionalistas más radicales! ¡No es necesaria la HQ y la FQ para aprenderla!

Sin embargo, este principio de formalización matemática de la química ha fracasado porque no se ha encontrado este tipo de lenguaje sin ambigüedades, similar al lenguaje de los matemáticos. Y no se debe a que el lenguaje de la matemática sea difuso, sino porque es imposible construir un lenguaje lógico en una disciplina como la química que tiene un origen distinto a la disciplina matemática. Esto, como veremos a continuación impide que de manera permanente se conecte la teoría con la práctica de forma unívoca en la química escolar (QE).

La conexión entre las dos propuestas: *empirista y racionalista,* mediante un mecanismo hipotético-deductivo que viene de la experimentación, vuelve así hacia atrás, puesto que *todo está contaminado de teoría*, es decir, todo lo que experimentemos en química está influenciado previamente por una teoría que tenemos, que es la que nos ha impulsado a realizar ese experimento. Esta observación es muy importante pues nos lleva a la constatación de que no se pueden diferenciar los términos observacionales de los teóricos con absoluta exactitud en la clase de química, si no se promueve la argumentación y la explicación que son competencias de pensamiento científico propias de la HQ y FQ. En consecuencia, en esta concepción heredada del positivismo lógico se ha de hablar de *ciertas reglas de correspondencia* entre los fenómenos propiamente observacionales de la química y sus teorías. Hay una estructuración sintáctica y semántica con una configuración determinada por axiomas que recogen lo esencial de la teoría en su lenguaje propio y lo conectan con el mundo empírico, con el mundo de los fenómenos 'en química' por ejemplo la *combustión* que es un cambio químico *puede expresarse* por

$$A + B \rightarrow C \quad \text{o bien} \quad C + O_2 \rightarrow CO_2$$

Estas *reglas de correspondencia* que plantea el positivismo lógico buscan vincular de una manera más apropiada el *mundo de la teoría y el empírico* en química. El problema es que al hacer esto se va viendo que es muy difícil disponer de términos puramente teóricos u observacionales porque los últimos ya están *contaminados de teoría* desde el principio. Entonces, esta visión no es que sea falsa, es válida como modelo de teoría, pero *no funciona en todos los casos.* ¿Qué significa que funcione o no funcione este modelo de teoría? Quiere decir que yo puedo y no puedo reconstruir la realidad según la teoría del científico, axiomatizando, algunos principios y distinguiendo lo empírico para encontrar

finalmente un *modelo de correspondencia.* Un ejemplo lo podemos ver reflejado en la Teoría Acido-Base, según Lewis, Brönsted-Lowry y Arrhenius y que me permito describir brevemente a continuación.

Lavoisier (1775) tenía un conocimiento limitado acerca de los ácidos fuertes, tales como el nítrico y el sulfúrico. Afirmaba que la *acidez de una sustancia dependía de la cantidad de oxígeno que contenía*, ya que 'en su época' no conocía las composiciones reales de los haluros de hidrógeno y otros ácidos fuertes. Sus ideas se concibieron 'correctas' por varias décadas, aun cuando científicos como Berzelius y von Liebig le hicieron modificaciones y propusieron otras visiones. Posteriormente, Arrhenius empezó a ver más claramente cómo *funcionaban* los ácidos y las bases. Más tarde, los fisicoquímicos Brönsted y Lowry desarrollaron independientemente su propia teoría, pero fue el fisicoquímico Gilbert Lewis que propuso una nueva definición de los ácidos y bases en 1923, mismo año en que Brönsted y Lowry detallaron su propia teoría sobre estas sustancias químicas. Vemos entonces que tres teorías sobre la 'misma sustancia' *explican lo mismo con diferentes metodologías y lenguajes* en distintos momentos de la HQ. ¿Cómo decido cual enseñar primero si sus axiomas representan diferentes preguntas y caminos en la HQ y FQ? (Izquierdo, 1995; Izquierdo *et al.*, 2014).

Este modelo no funciona siempre. Las teorías que no pueden ser reconstruidas así, no son teorías científicas, ya que una teoría científica para considerarse como tal ha de ser axiomatizada adecuadamente según este modelo. En la HC ha quedado en evidencia que eran tantos los *problemas y explicaciones* que no satisfacían esta interpretación, que ninguna teoría se podía reconstruir al ciento por ciento de esta forma. Esto significa que, de alguna manera, la diferenciación *estricta entre términos observacionales y teóricos en química* no ha sido ni es posible. A partir de 1940 se empieza a consolidar la idea de que *todo está impregnado de teoría,* es decir, de que vemos el mundo y lo representamos de acuerdo con nuestras propias ideas. Un componente relevante que apoyará esta reflexión es el *fenómeno del lenguaje* a través de la Pragmática de la lengua que influirá decididamente en las relaciones HQ-FQ-DQ con las aportaciones de Wittgenstein (1958).

Todavía profesores y científicos somos *herederos* de la concepción positivista lógica del Círculo de Viena. En química le damos a los axiomas valores muy grandes y cuando enseñamos nos parece que lo más importante es saber los axiomas (signos, fórmulas, cálculos) ya que las *relaciones de correspondencia* vendrán luego. En consecuencia, los programas de *racionalidad fuerte o categórica de un camino* seguro

para vincular experimentos e ideas o, dicho de otra manera, de la identificación de la química con la matemática fracasan, no se pueden aplicar a una genuina enseñanza de la química para aprender a pensar.

2. Constructivismo irracional. Su interpretación en la química y su enseñanza

El principal defensor de esta corriente filosófica es el estadounidense Thomas Kuhn que además de su formación en FC, fue un físico e historiador, conocido por su contribución al cambio de orientación de la filosofía y la sociología científica en la década de 1960. Plantea la idea básica de que *la ciencia no crece acumulativamente*. Su concepto central es el de *paradigma,* considerando el saber científico como un *proceso discontinuo.* Esto, sin embargo, se transforma en una cuestión muy subjetiva para la comunidad científica, pues señala que habría cambios de paradigmas que no se sabe *cómo aparecen o cómo desaparecen*, lo que denomina *Revoluciones Científicas* (Kuhn, 1972). Esta idea de la *naturaleza de la ciencia* es poco práctica en el momento de reconstruirla sin perder de vista la posibilidad de caer en la irracionalidad. Porque si Kuhn dice que un mismo experimento visto desde una teoría o visto desde otra se puede justificar de la misma manera ¿Cómo sabemos que una teoría en química es mejor que la otra si las dos justifican lo mismo? ¿Qué consecuencias tiene ello para la enseñanza y el aprendizaje de la química? Por ejemplo. ¿Qué teoría *es mejor* para enseñar 'ácido-base'? ¿Cómo puedo identificar y seleccionar (si es que la hubiera) la mejor teoría y los *mejores experimentos* para enseñarla? La HC nos demuestra que los químicos *se quedan* con una teoría y no con la otra. En definitiva, actúan por presiones sociales porque la justificación de la teoría por los experimentos, no se da. Considera que los conceptos, teorías, y procedimientos de una ciencia normalmente son estables y ocasionalmente *cambian radicalmente*.

3. El constructivismo racional-moderado en la química y su enseñanza

El racionalismo moderado llamado también *racionalismo hipotético* (Izquierdo, 1996) se puede explicar desde al menos dos vertientes lo suficientemente caracterizadas hasta ahora: El *cambio conceptual* de Toulmin (1977) y el *modelo cognitivo de ciencia* desarrollado por Giere (1994) que han sido los *fundamentos filosóficos del constructivismo didáctico* y que describiré brevemente a continuación.

3.1. Cambio conceptual y razonabilidad en química (y en las ciencias)

Stephen Toulmin, pensador y filósofo británico (1922-2009) plantea "*Que en la ciencia y la filosofía por igual, la preocupación exclusiva por la sistematicidad lógica ha resultado destructiva para la comprensión histórica y la crítica racional. Los hombres demuestran su racionalidad, no ordenando sus conceptos y creencias en rígidas estructuras formales, sino por su disposición a responder a situaciones nuevas con espíritu abierto, reconociendo los defectos de sus procedimientos anteriores y superándolos»* (Toulmin, 1977, citado por Chamizo, 2007, p.12). Introduce así la distinción entre 'racionalidad y razonabilidad', señalando que al considerar la idea convencional de ***racionalidad*** como aquella en la que los argumentos se centran en conceptos formales y las explicaciones apelan a leyes universales, neutrales, atemporales y descontextualizadas, esto se transforma en una limitación para comprender e interpretar el desarrollo del conocimiento científico. La ***razonabilidad*** se caracteriza por acentuar el valor del lenguaje en contextos diferentes del mundo real introduciendo así el componente cognitivo en las teorías de la ciencia. Según Chamizo (2007) esta visión ética, temporal y contextualizada parece complementar a esta parcial y tan persistente *racionalidad tradicional* de la comunidad científica. Para Toulmin el equilibrio entre estas dos formas de conocer, *racionalidad y razonabilidad,* se perdió hace ya varios siglos. De esta forma la *tradicional racionalidad absoluta* que hemos heredado de las visiones no constructivistas quedaría atrapada, comprometida y mediada por la inclusión de *razonabilidades relativas*. De esta forma el continuo desarrollo de la ciencia puede reconfigurarse permanentemente a partir de escenarios y contextos diversos. Izquierdo y Aliberas (2004) lo han representado de la siguiente manera (Fig. 2).

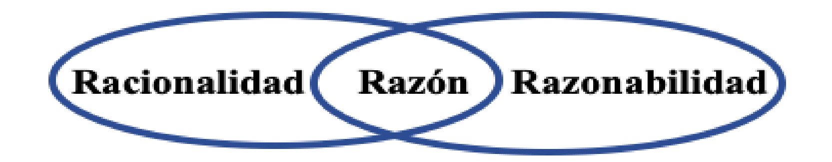


Figura 2. Representación de las relaciones entre racionalidad y razonabilidad (Izquierdo y Aliberas, 2004). Elaboración propia.

A diferencia de la visión radical e irracional de cambio científico de Kuhn, Toulmin piensa que el conocimiento científico está en *evolución constante*, sufriendo pequeños cambios. Su postura, toma como referencia la Teoría de la Evolución de Charles Darwin

publicada por primera vez el 24 de noviembre de 1859. Según su interpretación, las *teorías, procedimientos y lenguajes* de toda ciencia, 'funcionan' de manera parecida a los individuos de un sistema biológico, es decir, están sometidos a *leyes de selección natural*, a una dinámica de constante cambio y renovación. Para Toulmin, el factor determinante de la evolución, que en biología correspondería a la adaptación a "nuevos ambientes", sería la *utilidad práctica* del conocimiento científico. Así se introduce el concepto de *evolución conceptual o de esquemas conceptuales que* de un modo similar podemos darle una explicación desde la DQ, ya que la permanente evolución de los conceptos en la HQ es similar al continuo cambio de las ideas que nuestros estudiantes tienen sobre sus *teorías, métodos y lenguaje* (Cabrera y Quintanilla, 2014) Toulmin critica a Kuhn el abandono de la racionalidad científica en el momento clave de la reflexión sobre la ciencia y también la noción de revolución como una etapa de cambio distintiva de su modelo de progresión. Por ejemplo, el concepto de *afinidad* que hoy enseñamos en química *no es el mismo concepto* que se enseñaba y divulgaba en el siglo 18 y 19 (Bensaude y Stengers, 1997; Estany e Izquierdo, 1990).

La base de la argumentación que nos aporta Toulmin (Tabla 2) establece a lo menos tres *tipos de metodologías* científicas que la ciencia ha utilizado para resolver sus problemas a través de la historia: i) mejorar las *representaciones teóricas,* ii) introducir nuevos *lenguajes*, iii) refinar los *métodos* de intervención experimental. El primero se refiere en particular al Pensamiento (modelos teóricos de la ciencia, enunciados, leyes); el segundo al Lenguaje como problema (argumentos, explicaciones, narraciones, textos, nuevas reglas del juego) y finalmente el tercero a la Experiencia, que se refiere en particular a la actividad experimental.

Del mismo modo, los cinco *problemas de la ciencia* han sido ampliamente definidos y caracterizados según se ilustra en la Tabla 1 y 2.

Metodologías para abordar problemas científicos	Tipologías de problemas (TP) a los que se enfrenta la ciencia experimental				
	TP1	TP2	TP3	TP4	TP5
Pensamiento (P)	PT1	PT2	PT3	PT4	PTP5
Lenguaje (L)	LT1	LT2	LT3	LT4	LT5
Experiencia (E)	ET1	ET2	ET3	ET4	ET5

Tabla 2. Relación entre los problemas de la ciencia y las 3 metodologías para abordarlos. **P** Mejorar las representaciones teóricas**; L:** Introducir nuevos lenguajes; **E** Refinar los métodos e instrumentos experimentales (elaboración propia)

TP1 Extensión de procedimientos explicativos actuales a nuevos fenómenos **TP2** Mejorar las explicaciones sobre determinados fenómenos **TP3** Integración interdisciplinaria de ideas dentro de una misma ciencia **TP4** Integración interdisciplinaria de las ideas de diferentes disciplinas **TP5** Resolución de conflictos entre científicos e ideas extra científicas

Tabla 3. Clasificación de problemas científicos según Toulmin (1977)

Tanto el paradigma discontinuo de Kuhn como la visión de cambio conceptual de Toulmin son controversiales para la enseñanza de la química. Ambos critican el carácter irrelevante del empirismo ya que, según ellos, no explica 'el qué' del hecho científico, centrándose en el contexto del descubrimiento. Según estos filósofos, resulta difícil encontrar respuestas concretas a un hecho particular, histórico de la ciencia. Concentran su análisis en la HC más que en una evolución lógica para comprender como trabaja y avanza la ciencia, introduciendo así una *visión evolutiva o diacrónica del saber científico.*

3.2. El modelo cognitivo de ciencia (MCC)

Tanto la psicología, la neurociencia, la lingüística, la sociología de la ciencia, la antropología y la filosofía de la ciencia intentan de explicar cómo funciona y se genera el conocimiento científico humano en la mente de las personas. En esta postura, las ciencias son vistas como empresas profundamente humanas: su objetivo es interpretar el mundo utilizando para eso la capacidad que tenemos de emitir juicios. Esto lleva a desdibujar las fronteras entre el pensamiento científico y cotidiano y da lugar a nuevos modelos de ciencia (Giere, 1992, 1994; Izquierdo, 2007).

Aunque no se pueda justificar, se ha de aceptar un cierto *Principio de Inducción* para comprender el significado de la ciencia y la configuración de un modelo más cercano a la química que enseñamos en la escuela o química escolar (QE). Actualmente, las ciencias cognitivas nos resuelven en parte esta situación, inspirándonos para fortalecer las relaciones metateóricas HQ-FQ-DQ. Cada una con su 'nicho autónomo' y relacionadas entre sí de manera dinámica e influenciadas por diferentes ambientes sociales, políticos, científicos y culturales (*nivel externo*) que promueven así a la configuración de una 'triada virtuosa' para enseñar y aprender química (*nivel interno*), según lo ilustro en la Figura 3.

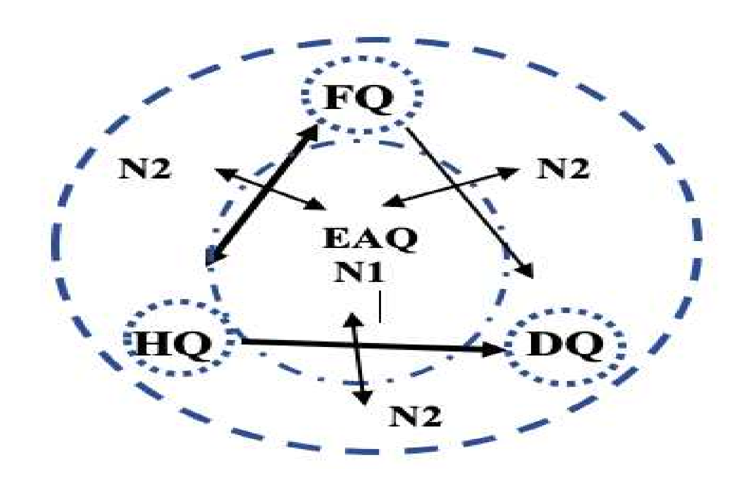


Figura 3. Representación de las relaciones FQ-HQ-DQ. **N1** es el nivel QE con todas sus complejidades. N2 es el nivel externo. N1 y N2 se vinculan de manera virtuosa, dinámica y sinérgica (Elaboración propia).

Aquí está el núcleo de una nueva química escolar **(NQE)** y el fundamento de nuestras próximas reflexiones. La línea cognitiva de enseñanza de las ciencias, fundamenta su modelo en el carácter estático y dinámico del conocimiento científico. Por lo tanto, la interpretación y explicación de la química ha de contribuir a la convergencia de los conceptos que históricamente han estado en *tensión* y que he venido analizando hasta ahora: el ***descubrimiento y la justificación*** del hecho científico en la HQ y FQ.

Los científicos cognitivos cuestionan la *filosofía clásica* (absolutista), por configurar y promover ideales de ciencia con los cuales la comunidad científica no trabaja y, en consecuencia, con los que no se identifican ni teórica ni metodológicamente. Se distancian así, de la filosofía y la sociología, intentando establecer una disciplina con nuevos principios, sin otra finalidad que la de *explicar la ciencia como construcción humana* en permanente transformación. Esta postura resulta mucho más estimulante y enriquecedora en el análisis e interpretación de los hechos y las teorías desde la HQ y la FQ. El MCC (Izquierdo *et al*., 2016) se convierte así en una orientación teórica, metodológica y lingüística muy potente y estimulante porque caracteriza la ciencia en el aula como actividad que reconoce todo el repertorio cognitivo del sujeto que aprende y enseña (ideas, emociones, valores, historia personal, lenguajes, cultura). Giere nos proporciona desde sus planteamientos, una visión que humaniza la producción del conocimiento científico, que nos permite introducir la HQ y FQ en la formación del profesorado y en la enseñanza de las ciencias con finalidades valiosas.

En el MCC, las leyes no serían entonces, generalizaciones empíricas bien confirmadas, sino que dependerían del juicio del científico y del contexto en el que se analizan, oponiéndose así a la concepción clásica de *racionalidad categórica*, que no admite ni valora los juicios de los científicos en la toma de decisiones y producción de conocimiento. En una concepción naturalista de la ciencia, existe una constante aproximación a la verdad, que es parte de la esencia misma de la actividad científica que desarrollan hombres y mujeres (Alvarez–Lires, 2014; Quintanilla y Solsona, 2019; Solsona, 2014).

Así, el MCC se ajusta muy bien a una *nueva química escolar*. Giere utiliza este modelo para la ciencia de los científicos proponiendo que para saber *cómo es una teoría científica*, es necesario saber *cómo la utiliza y la comunica la comunidad científica*. Profundiza en su análisis para explicarnos como aparecen las teorías en los libros de texto especializados y cómo usan de ellas los científicos en sus discusiones y contextos específicos (Cabrera y Quintanilla, 2014). Da un lugar preferencial a lo que llama **Modelos Teóricos** (MT), cuya idea central es que construimos en nuestra mente estructuras complejas o *representaciones mentales* parecidas a las que utilizamos en la vida cotidiana y que consisten en la representación de fenómenos y los principios que les vinculan, teniendo como unidad estructural los conceptos científicos que actúan como *mapas internos del mundo externo*. La principal diferencia sería que las representaciones científicas utilizan un lenguaje axiomatizado y las representaciones cotidianas no. A partir de aquí se constituye un momento histórico muy interesante que tensiona desde las visiones tradicionales de la ciencia la idea de *subjetividad y objetividad* en la producción de conocimiento, tanto necesaria como relevante para promover una convivencia genuina y urgente en nuestra sociedad (Ávila y Maturana, 2021).

Los **MT** son en esta concepción de la ciencia, los medios a través de los cuales los científicos representan el mundo, tanto para sí mismos como para los demás y, en consecuencia, son ajustes del mundo externo en ciertos aspectos, con determinados propósitos que no se pueden calificar de verdaderos o falsos. Giere (1994) califica su postura como *realismo naturalista* o *realismo pragmático*. ***Realista*** al considerar que la ciencia intenta representar e interpretar el mundo con determinadas ideas debidamente caracterizadas y ***naturalista*** porque pretende explicar los juicios y decisiones científicas a partir de sus criterios propios y no de principios racionales de carácter general tal y como lo plantean los ‘positivistas tradicionales´. Esta sería por así decirlo, la *novedad epistemológica de este modelo de ciencia.*

Como profesorado de ciencias, nos apropiamos en contexto de estas orientaciones teóricas con la finalidad de configurar una propuesta de la enseñanza de la química escolar (QE) basada en el fenómeno cognitivo humano. Los planteamientos del MCC nos permiten así, establecer relaciones valiosas entre la producción del conocimiento científico aceptando la HQ y la FQ como disciplinas metacientíficas relevantes para ‘aprender a comprender’ (y a enseñar) el desarrollo de la química como disciplina científica, valorándola como actividad profundamente humana y transformando la clase en un foro de discusión que introduce explicaciones, argumentos, descripciones y justificaciones del conocimiento que enseñamos, promoviendo un aprendizaje científico competencial e interesante para el estudiantado (Izquierdo, 2007).

Tres serían los principales postulados del MCC que se ajustan a las ciencias experimentales en general o a la química en particular y que requieren un proceso de transposición didáctica debidamente orientado (Estany e Izquierdo, 1990) y que se describen en la Tabla 4.

Postulado	Aplicado a la Química	Aplicado a la Química Escolar (QE)
El mundo se interpreta con teorías	La comunidad científica reconoce, valora y explica las diferentes teorías debido a un conocimiento consensuado o de lenguajes convencionales (IUPAC).	La química es experimental. Su modelización en la clase depende de los fenómenos que se interpretan teóricamente a partir de las representaciones iniciales del alumnado que van cambiando durante el proceso de aprendizaje.
El método de interpretación de las teorías es evolutivo, dinámico y diverso	Las teorías en química cambian sistemáticamente y se ajustan a los nuevos instrumentos y lenguajes que se reconfiguran en la producción de conocimiento especializado.	Valoramos los diferentes discursos que se van complejizando en el aula de química y haciendo más coherentes a medida que se *desarrolla* el pensamiento científico del estudiantado. El lenguaje es un problema social, histórico, cognitivo y cultural.
Las teorías dependen del juicio de los científicos y científicas	Cada científico(a) ve el mundo como lo quiere ver y no como realmente es. Actividad profunda humana. Valoración de las subjetividades	Considera las emociones, lenguajes, valores y cultura del estudiantado para aprender a comprender como la HQ y la FQ son valiosas para mejorar la calidad de su pensamient

Tabla 4. Postulados del MCC y su contribución a las relaciones HQ, FQ y DQ (diseño propio)

No podemos desconocer, omitir o evadir la importancia del componente teórico en la enseñanza de la QE., pues podemos ‘caer’ en un activismo, que será motivador para los alumnos, pero en verdad eso no es enseñar química (Izquierdo, 2007). En el otro extremo, trabajar los componentes teóricos, desde una química sólo axiomatizada, desvinculada del mundo real, tampoco es hacer ni enseñar química.

4. Propuestas para formalizar la HQ y FQ en la QE

En nuestro laboratorio, desde hace dos décadas, hemos reportado en diferentes investigaciones, aportes teóricos y metodológicos a partir de innovaciones y hallazgos en el trabajo sistemático con profesorado en formación y en ejercicio en temas relacionados con sus representaciones sobre la naturaleza de la ciencia, historia de la química, prácticas experimentales, libros de texto, entre otros y que dejan en evidencia las tensiones epistemológicas entre la ciencia y su enseñanza (Izquierdo *et al.*, 2014; Orellana, Quintanilla y Páez, 2018; Quintanilla, Orellana y Páez, 2020).

Así, en este último apartado quisiera presentar algunas de estas propuestas que, debidamente orientadas, pueden contribuir a promover esta *tríada virtuosa* HQ-FQ-DQ y que hemos venido trabajando la formación inicial y continua del profesorado de química, centrados en los aportes de estas metaciencias a la enseñanza de química. Al mismo tiempo, continuamos trabajando en la reconfiguración de marcos teóricos para fundamentar estas propuestas de innovación formadora en contextos diversos. Muchos de nuestros materiales ya han sido publicados y se están utilizando en nuestros países, aunque a escala más bien restringida según ambientes y condiciones de aprendizaje. En diferentes eventos científicos hemos ampliado mediante ejemplos concretos avances de la propuesta aquí presentada, retomando trabajos adelantados y ejecutados en Chile, Argentina, México, Brasil, Colombia y España (Izquierdo *et al.,* 2016; Labarca, Quintanilla y Izquierdo, 2022a,b; Leal, Cabrera y Quintanilla, 2019; Quintanilla, Izquierdo y Adúriz-Bravo, 2005; Quintanilla *et al.*, 2014).

Algunas de estas contribuciones se especifican en la Tabla 7 (www.laboratoriogrecia.cl) y tienen como finalidad promover el pensamiento competencial en el estudiantado. Estas oportunidades (y conocimientos) no abordadas en la clase habitual de química (controversias, polémicas, tensiones) pueden contribuir significativamente a que nuestros estudiantes aborden el aprendizaje de la química a partir de razonamientos superiores, favoreciendo así una mayor comprensión de su significado científico. El debate al que se pretende invitar a los alumnos, requiere de un enfoque histórico-filosófico por parte del profesorado con base en las directrices teóricas que acabo de presentar y se plantea con la intención de no limitarse a una transmisión de información sino a promover habilidades cognitivo-lingüísticas. El aporte de los estudios metacientíficos (historia y filosofía de la ciencia) permitirá al alumnado comprender la ciencia como un sistema de conocimiento vivo, que se modifica

constantemente en función de nuevas aportaciones, de nuevas preguntas y de dudas razonables que pueden conducir a nuevos descubrimientos. A través de las metaciencias como la Naturaleza de la Ciencia (NOS) y la Historia y Filosofía de la Ciencia (HPS) han surgido estrategias metodológicas fundamentadas desde la Didáctica de la Ciencia, a fin de enriquecer y problematizar la construcción del conocimiento científico escolar y con valor para la educación científica. Ello permite pensar sobre las ciencias y sobre cómo se construyen y problematizan promoviendo Competencias de Pensamiento Científico en el estudiantado. Para ello y a partir de las orientaciones propuestas por Toulmin para abordar problemas científicos (Tabla 6) se proponen 8 actividades que el profesorado de química puede decidir seleccionar y contextualizar a las secuencias de aprendizaje que le son propias en un ambiente de colaboración y trabajo en equipo, estimulando al diálogo y la sistematización de ideas de sus estudiantes.

Metodologías para abordar problemas científicos	Descriptor / orientaciones para el profesorado	Finalidad en el aula de química y en la promoción del desarrollo del pensamiento científico
Pensamiento (P)	Mejorar las representaciones teóricas del alumnado.	Modelizar.
Lenguaje (L)	Introducir nuevos lenguajes	Argumentar, explicar, describir. Justificar, dibujar, comunicar
Experiencia (E)	Refinar los métodos e instrumentos experimentales	Manipular instrumentos, medir, pesar, calcular

Tabla 6. Orientaciones para articular HQ, FQ y DQ en el aula.

Objetivo 1	Explicar historias contextualizadas, que pueden ser utilizadas por el profesorado desde un punto de vista filosófico, motivadoras para promover en el estudiantado determinadas actitudes y valores hacia la ciencia en general y la química en particular.
• Propuesta desde la historia y filosofía de la química	Introducción de conceptos científicos, para promover el interés por la química, para relacionar conocimientos de diferentes áreas (química, física, biología historia, filosofía, economía), fundamentando así el carácter interdisciplinario de la ciencia y de la enseñanza de la química.
• Componentes teóricos/ materiales	Estructura de la materia. Teoría Atómica. Mecánica Cuántica. Elemento y sustancia
• Metodología sugerida	Pensamiento - Lenguaje
• Énfasis competencial	Describir – Justificar - Explicar
Objetivo 2	Promover dramatizaciones de situaciones históricas, de debate, en las cuales el estudiantado pueda explicar y argumentar sus ideas sobre teorías en disputa, como se hace en FC
• Propuesta desde la historia y filosofía de la química	En uno de los ejemplos descritos en el capítulo anterior, un grupo de la clase será partidario de las ideas de Dalton, en tanto que otro grupo defenderá las ideas filosóficas de Demócrito.
• Componentes teóricos/ materiales	Estructura de la materia. Teoría Atómica. Mecánica Cuántica. Elemento y sustancia.
• Metodología sugerida	Pensamiento - Lenguaje
• Énfasis competencial	Explicar - Argumentar

Objetivo 3	Analizar prácticas experimentales históricas, destacando los fenómenos, instrumentos disponibles, teorías en disputa y la cosmovisión de valores en determinada época.¿Quién tenía la razón entonces? ¿ A qué lo atribuyes?
• Propuesta desde la historia y filosofía de la química	A través de las prácticas experimentales, explicar experimentos llevados a cabo por los científicos y científicas, lo que se convierte en un recurso importante para la comprensión de temas históricos y filosóficos en momentos y contextos particulares de producción de conocimiento
• Componentes teóricos/ materiales	Flogisto. Cambio químico. Combustión. Ley de conservación de la masa. Descomposición del agua por electrólisis
• Metodología sugerida	Pensamiento – Lenguaje - Experiencia
• Énfasis competencial	Describir – Justificar – Explicar - Argumentar
Objetivo 4	Reconocer y describir instrumentos antiguos, los materiales con que fueron elaborados, su estructura y funcionalidad, cómo se divulgaron, qué aportaron, las ideas teóricas que se favorecían o las controversias que se generaban en determinadas épocas
Propuesta desde la historia y filosofía de la química	Mediante láminas o esquemas obtenidos de reproducciones en diferentes revistas de divulgación científica, libros de texto o sitios en internet.
Componentes teóricos/ materiales	Alambique. Bomba de Vacío. Cuba hidroneumática. Balanza de precisión. Calorímetro.
Metodología sugerida	Pensamiento - Lenguaje
Énfasis competencial	Describir Justificar Explicar Argumentar
Objetivo 5	Analizar textos históricos y filosóficos relevantes para la química como se hace en la clase de lengua y literatura. Comprender su retórica, sus metáforas, sus analogías.
• Propuesta desde la historia y filosofía de la química	Favorecer la comprensión de los vínculos existentes entre la conceptualización y la experimentación, las preguntas que formulaban y los fenómenos que estudiaban en determinada época con una cosmovisión específica. Teorías en disputa
• Componentes teóricos/ materiales	Alegorías y analogías de la cultura alquímica. Ópera Omnia de Paracelso. El químico escéptico. Boyle. Tratado elemental de química de Lavoisier. Un nuevo sistema de filosofía química de Dalton. Bosquejo de un curso de filosofía química de Cannizzaro. Principios de química de Mendeléiev.
• Metodología sugerida.	Pensamiento – Lenguaje - Experiencia
• Énfasis competencial	Resumir Describir Justificar Explicar Argumentar
Objetivo 6	Conocer la vida y obra de científicos y científicas que destacan en la HQ y FQ. Visibilizar los aportes de las mujeres científicas en diferents campos del conocimiento
• Propuesta desde la historia y filosofía de la química	Así se promueve el análisis de aspectos humanos de las ciencias y el conjunto de valores (individuales y sociales) en los cuales se desarrollan y que normalmente no aparecen o atenúan los libros de texto especializados y las controversias con una visión androcéntrica o eurocéntrica de la HQ.
• Componentes teóricos/ materiales	María La judía, Lavoisier y Marie-Anne Pierrette Paulze. Hipatia la filósofa. Lise Meitner
• Metodología sugerida.	Pensamiento – Lenguaje - Experiencia
• Énfasis competencial	Resumir Describir Justificar Explicar Argumentar

Objetivo 7	Explicar situaciones históricas de crisis y duda que evidencien que el conocimiento científico no es un dogma ni una historia de buenos y malos científicos (villanos).
• Propuesta desde la historia y filosofía de la química	Por ejemplo, los planteamientos de Guy Lussac acerca del atomismo ¿influyeron en la aceptación de la teoría de John Dalton? ¿De qué forma? ¿Qué consecuencias tiene este análisis histórico y filosófico para el aprendizaje de la química?
• Componentes teóricos/ materiales	Flogisto, Demócrito y Aristóteles, Pasteur y Pouchet, Lavoisiery Sthal
• Metodología sugerida	Pensamiento – Lenguaje - Experiencia
• Énfasis competencial	Resumir Describir Justificar Explicar Argumentar
Objetivo 8	Promover el análisis de entramados o tejidos histórico-políticos, histórico geográficos, histórico-sociales o histórico-económicos que favorecieron o no el desarrollo y divulgación de la ciencia.
• Propuesta desde la historia y filosofía de la química	Por ejemplo, ¿cómo se divulgaron las ideas de J. Dalton mientras vivió y después de su deceso? ¿Qué acontecimientos históricos influyeron para que buena parte de sus escritos se perdieran? ¿Qué consecuencias tuvo ello para la historia y 'reconfiguración de la Teoría atómica?

Tabla 7. Experiencias de docencia e investigación para promover competencias de pensamiento científico utilizando la HQ y la FQ en el aprendizaje de la química.

Las anteriores son algunas de las numerosas posibilidades que tenemos a nuestro alcance para ser utilizadas tanto en la formación de docentes como para ser direccionadas hacia la educación básica, media y universitaria. El camino que se ha recorrido va dejando espacios y lugares que pueden servir para futuras investigaciones y la creatividad e imaginación de nuevas propuestas.

5. Reflexiones finales

A lo largo de este capítulo he desarrollado algunas ideas con la finalidad de justificar los orígenes, relevancia, pertinencia y desarrollo metateórico de las relaciones HQ-FQ-DQ de manera que se haga visible para todos aquéllos que, quizás, la consideran innecesaria o poco relevante. Mi propósito fue reflexionar teóricamente como estas relaciones 'virtuosas' pueden contribuir a la formación inicial y continua del profesorado de química considerando las nuevas aportaciones de la filosofía cognitiva a la comprensión de la dinámica del conocimiento científico. Logramos identificar y caracterizar 'razonablemente' algunos campos estructurantes de la HQ, FQ y DQ que promueven una genuina y robusta enseñanza de la química y, junto a ello, aprendizajes de nivel superior, sustentados en competencias de pensamiento científico tales como la explicación y la argumentación en química.

Desde esta perspectiva, la HQ y la FQ alertan y desafían de manera genuina al profesorado de química e investigadores/as especializados/as en la disciplina sobre la necesidad urgente y necesaria de favorecer nuevos ambientes, condiciones y oportunidades de aprendizaje de las ciencias. Además, nos permite conocer el genuino dinamismo del conocimiento científico en épocas determinadas, los desacuerdos provenientes de las comunidades científicas existentes, las teorías en disputa e inclusive analizar la influencia de los conflictos de género en la divulgación del conocimiento y en el desarrollo de una sociedad (Lires, Nuño y Solsona, 2002; Quintanilla y Solsona, 2019; Solsona, 2014). Para ello es necesario orientar narraciones e historias que introducen al estudiantado en una actividad científica llevada a cabo por personas 'reales', en la época que les correspondió vivir, con sus propias convicciones, motivaciones y expectativas; que vivieron situaciones políticas y sociales particulares que influyeron en su trabajo y actitud hacia la ciencia; y también para promover nuevas reflexiones y comprensiones sobre el sentido del conocimiento y de la actividad científica en un mundo complejo. Además, nos permite conocer la relación entre la ciencia y la cultura de una época específica, analizando de esta forma la influencia de estas en el desarrollo y consolidación de una sociedad determinada que comparte unos valores que se resignifican permanentemente pensando en el futuro. Al respecto hay un camino fértil, que si bien ya se ha iniciado hace más de tres décadas, aún queda mucho por desarrollar y construir colaborativamente.

Referencias bibliográficas

Alvarez–Lires, M. (2014). "Algunas orientaciones para la formación docente en historia de las ciencias". En: Quintanilla, M.; Daza, S. y Cabrera Castillo, H. G. (eds.). *Historia y Filosofía de las Ciencias. Aportes para una 'nueva aula de ciencias', promotora de ciudadanía y valores*. Bellaterra: Santiago de Chile, pp.52–65.

Ávila, X. y Maturana, H. (2021). *La revolución reflexiva.* Paidós: Barcelona.

Bachelard, G. (1989). *La formación del espíritu científico.* Siglo XXI: Madrid.

Bensaude, B. y Stengers, I. (1997). *Historia de la Química.* Addison-Wesley: Madrid.

Cabrera, H. y Quintanilla, M. (2014). "Un análisis de la estructura de dos experimentos asociados a la combustión: algunas implicaciones para la formación inicial docente". En: Quintanilla, M.; Daza, S. y Cabrera Castillo, H. G. (eds.). *Historia y Filosofía de las Ciencias. Aportes para una 'nueva aula de ciencias', promotora de ciudadanía y valores*. Bellaterra, Santiago de Chile, pp.201–215.

Chalmers (1993). *¿Qué es esa cosa llamada ciencia?.* Siglo XXI: Madrid.

Chamizo, J. A. (2007). "Las aportaciones de Toulmin a la enseñanza de las ciencias". *Enseñanza de las Ciencias* 25: 133–146.

Estany, A. y Izquierdo, M. (1990). "La evolución del concepto de afinidad analizada desde el modelo de S. Toulmin". *Llull* 13: 349–378.

Giere, R. (1992). "What the cognitive study of science is not?", En: Giere, R. (Ed.), *Cognitive Models of Science*, University of Minnesota Press: Minnesota, pp.481–484.

Giere, R. (1994). "The cognitive structure of scientific theories". *Philosophy of Science* 61: 276–296.

Izquierdo, M. (1995). "La función de las fórmulas en la formación y divulgación del conocimiento científico". *X Jornadas de Historia y Filosofía de la Ciencia*, Vigo, Galicia.

Izquierdo, M. (1996). "Cognitive models of science and the teaching of science, history of science and curriculum", En: *Proceedings of the Second ESERA Ph.D.* Summer School. Salónica: The Art of Text.
Izquierdo, M. (2007). "Enseñar ciencias. Una nueva ciencia". *Enseñanza de las Ciencias Sociales* 6: 125–138.
Izquierdo, M. y Aliberas, J. (2004). *Pensar, actuar i parlar a la clase de ciéncies.* Serveis de Publicacions, Universidad Autónoma de Barcelona: Barcelona.
Izquierdo, M.; Quintanilla, M.; Vallverdú, J. y Merino. C. (2014). "Una nueva reflexión sobre la historia y filosofía de las ciencias y la enseñanza de las ciencias". En: Quintanilla, M.; Daza, S. y Cabrera Castillo, H. G. (Eds.). *Historia y Filosofía de las Ciencias. Aportes para una 'nueva aula de ciencias', promotora de ciudadanía y valores*. Bellaterra: Santiago de Chile, pp.29–50.
Izquierdo, M.; García, A.; Quintanilla, M. y Adúriz-Bravo, A. (2016). *Historia, Filosofía y Didáctica de las Ciencias: Aportes para la formación del profesorado de ciencias*. Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Ediciones DIE: Bogotá.
Kuhn, T. S. (1972). *La estructura de las revoluciones científicas.* Fondo de Cultura Económica: México.
Labarca, M.; Quintanilla, M. y Izquierdo, M. (2022a). "El problema del grupo 3 de la tabla periódica: su enseñanza mediante la argumentación y la explicación científica. Primera parte". *Ciência & Educação (Bauru)* (28), e22013: 1–13.
Labarca, M.; Quintanilla, M. y Izquierdo, M. (2022b). "El problema del grupo 3 de la tabla periódica: su enseñanza mediante la argumentación y la explicación científica. Segunda parte". *Ciência & Educação (Bauru)* (28), e22014: 1–12.
Lavoisier, A. (1775). "Memoria sobre la naturaleza del principio que se combina con los metales durante la calcinación y que causa el aumento de su peso". En: J. Muñoz, L. Leloir y E. Braun (Eds.), *Memorias sobre el oxígeno, el calórico y la respiración*. EMECÉ: Buenos Aires, pp.81–90.
Leal, A. Cabrera, G. y Quintanilla, M. (2019). "Tendencias acerca de los instrumentos científicos en la revista Science & Education entre 2012-2016". En: *Enseñanza y aprendizaje de las ciencias* CIEDUC Vol. 1, 506–515.
Lires, M.; Nuño, T. y Solsona, N. (2002). *Las científicas y su historia en el aula*. Madrid: Editorial Sintes.
Orellana, C.; Quintanilla, M. y Páez, R. (2018). "Concepciones sobre enseñanza **y** aprendizaje de las Ciencias Naturales de educadoras de párvulos en formación en Chile **y** sus relaciones con modelos de racionalidad científica". *Ciência & Educação* 24: 1029–1041.
Popper, K. (1995). *En busca de un mundo mejor.* Paidós: Barcelona.
Quintanilla, M.; Izquierdo, M. y Adúriz-Bravo, A. (2005). "Characteristics and methodological discussion about a theoretical model that introduces the history of science at an early stage of the experimental science teachers' professional formation". *Proceedings of the International Conference of History and Philosophy of Science and Science Teaching.* University of Leeds, England.
Quintanilla, M.; Solsona, N.; García, A. y Álvarez, M. (2014). "Uso de la Historia de la Química como dispositivo teórico y praxeológico para promover competencias de pensamiento científico". En: Quintanilla, M. (Ed.), Las *competencias de pensamiento científico desde las emociones, sonidos y voces del aula*. Volumen 8, Bellaterra: Santiago de Chile, pp.53–96.
Quintanilla, M. y Solsona, N. (2019). *Mujeres, Ciencia y Educación en América Latina*. Bellaterra: Santiago de Chile.
Quintanilla, M.; Orellana, C. y Páez, R. (2020). "Representaciones epistemológicas sobre competencias de pensamiento científico de educadoras de párvulo en formación", *Enseñanza de las Ciencias* 38: 47–66.
Solsona, N. (2014). "Las mujeres en la historia de la ciencia". En: Quintanilla, M.; Daza, S. y Cabrera Castillo, H. G. (eds.). *Historia y Filosofía de las Ciencias. Aportes para una 'nueva aula de ciencias', promotora de ciudadanía y valores*. Bellaterra: Santiago de Chile, pp.155–177.
Toulmin, S. (1977). *La comprensión humana.* Alianza Universidad: Madrid.
Wittgenstein, L. (1958). *Philosophical Investigations*. Blackwell: Oxford.

CAPÍTULO 13

¿Es posible una filosofía feminista de la química?

Mariana Córdoba
CONICET – Universidad de Buenos Aires

1. La filosofía feminista de la ciencia

Las epistemologías feministas, enmarcadas en las epistemologías críticas e iniciadas de manera sistemática a fines de los años 70', se han nutrido de ideas provenientes de la filosofía histórica de la ciencia de los años 60' y han dialogado, entre otras corrientes, con la sociología de la ciencia (Blazquez Graf, 2008; Bach 2010). Existen distintas posiciones dentro de la epistemología feminista, que Sandra Harding clasificó como empirismo feminista, teoría del punto de vista feminista y posmodernismo feminista (Harding, 1986; *cfr*. Anderson, 2019).

Durante el siglo XX, las filósofas feministas de la ciencia pertenecientes a las tres corrientes, partiendo de diversos compromisos teóricos, han analizado variados aspectos de la ciencia. Además de haber reflexionado sobre los problemas propios del campo de la filosofía de ciencia hegemónica, han destacado el rol que en la ciencia cumplen los factores usualmente considerados extra-científicos y, en particular, los *valores* relativos al sistema de género.

El sistema de género puede ser definido como una estructura de relaciones que instituye, dentro de las sociedades, diferencias entre varones y mujeres. A su vez, este sistema excluye, discrimina y estigmatiza las corporalidades, identidades y sexualidades disidentes o no hegemónicas (Maffía y Cabral, 2003; Córdoba, 2020a). Es debido a esta estructura que los derechos y las obligaciones se distribuyen de modo desigual, y que ciertos derechos pretendidamente universales son diferenciales en la realidad. En dicho sistema hallamos dos posiciones en los extremos: la posición privilegiada y dominante del varón blanco (el "sujeto universal" en el sentido de Segato 2018), y la correspondiente a otros grupos *minorizados* (que constituyen el sujeto particular o parcial (Segato, 2018)), conformados por mujeres, negrxs, indígenas, trabajadorxs, lesbianas, homosexuales, personas trans y otros/as/es/xs. En virtud de que la mayoría de los derechos son, para

estos últimos grupos, meramente formales antes que efectivos, se establece su lugar de sujetxs minorizadxs en relación con el polo opuesto del sistema, que goza de plenos derechos. El sistema de género es, entonces, un sistema relacional, en el cual las asignaciones de roles y prerrogativas se dan, precisamente, sobre la base de una relación: ciertos grupos detentan privilegios en la medida en que otros carecen de derechos. Resulta evidente, en esta caracterización, que el "patriarcado"[21] (denominación que ciertas autoras dan a este sistema de género) es un sistema de poder jerárquico (Segato, 2018).

Las distintas posiciones feministas sostienen que el conocimiento científico debe analizarse en tanto conocimiento *situado* (Harding, 1991; Haraway, 1995; Longino, 2016), pues es el producto de las interacciones sociales entre miembros de una comunidad y de las interacciones que se dan entre dichos miembros y los objetos bajo estudio (Maffía, 2007). Quienes producen conocimiento científico están situadxs histórica y socialmente, de manera que tanto sus observaciones como sus razonamientos necesariamente reflejan sus propias situaciones (Longino, 2016). Las filósofas feministas han acordado, además, en denunciar el carácter *androcéntrico* del conocimiento científico. De acuerdo con Diana Maffia, dicho carácter radica en que el conocimiento científico pretende ser universal y objetivo cuando en rigor expresa un punto de vista particular. Ahora bien, que un punto de vista particular se tome como universal no es un "error", sino que se debe a que aquel es el punto de vista correspondiente al polo dominante de la relación que constituye el sistema de género: al del *"varón adulto, blanco, propietario, capaz"* (Maffía, 2007, p.1).

Las visiones feministas sobre la ciencia coinciden en señalar la ubicuidad del género y el papel fundamental que juega como categoría analítica (Pérez Sedeño, 1995). Y aceptan ciertas críticas formuladas en la filosofía general de la ciencia hegemónica no feminista, que concluyen que la noción de objetividad de la ciencia (de las teorías científicas, de sus métodos, de su validación, etc.) debe ser reformulada y entendida en términos de intersubjetividad; pero advierten que la intersubjetividad implica un conjunto de creencias y valores compartidos, de manera que necesariamente supone el lugar situado de lxs investigadorxs. La crítica feminista no solo pone en cuestión la pretensión de verdad, universalidad y objetividad del conocimiento científico, sino que también cuestiona que sea siquiera posible referir a los sectores de la realidad bajo estudio

[21] Otras autoras se refieren a este sistema como sistema "sexo-género" (Rubin, 1975; Haraway, 1995).

disciplinar, intentar descubrir/proponer regularidades en ellos y explicarlas de un modo que no se vea afectado por el sistema relacional del género (Córdoba, 2020b). Ahora bien, para evitar incomprensiones, cabe aclarar que la puesta en cuestión de ciertas valoraciones acerca de la ciencia, no supone necesariamente poner en cuestión que el conocimiento científico constituya el grado máximo de conocimiento que pueda alcanzarse. Muchas filósofas feministas sostendrán que es necesario analizar la ciencia en tanto conocimiento situado, es decir, atravesado por múltiples relaciones de poder, pero que esto no invalida sus logros, sino que debemos hacer una crítica que apunte a modificar tales condicionantes. Muchas feministas, en el marco del empirismo feminista, sostienen que el conocimiento científico es el conocimiento más confiable y la evidencia empírica, su base menos débil (Longino, 1990). Por otra parte, si bien es posible sostener que debe hacerse ciencia libre de sesgos y/o condicionantes, la posición más extendida es que tal tarea es imposible, pero que la actividad científica puede comprometerse con condicionantes que propugnen la igualdad de los géneros, la no discriminación sobre la base de los géneros, entre otros tipos de compromisos políticos.

Los distintos enfoques feministas han denunciado la sistemática exclusión de las mujeres de la historia de la ciencia, el significativo olvido de sus aportes al desarrollo de las ciencias (Gonzalez García y Pérez Sedeño, 2002; Maffía, 2007; Mc Manus, 2020). ¿Por qué las mujeres han sido excluidas de la ciencia? De acuerdo con Maffía, el sistema científico en el mundo ha sido erigido por varones y son los varones quienes legitiman el orden que ellos mismos han creado, negando a las mujeres la posibilidad de participar de sus instituciones, justificando esa prohibición apelando, por ejemplo, a nuestra falta de racionalidad, objetividad, capacidad de abstracción o capacidad lógica –las condiciones necesarias para hacer ciencia. A las mujeres se nos atribuyen condiciones como la sensibilidad, la subjetividad, etc. (Maffía, 2007). En este sentido, afirma Londa Schiebinger que la exclusión de las mujeres es también la exclusión de una serie de valores, condiciones y características que se consideran "femeninas" (Schiebinger, 2004). ¿Quiénes caracterizan así a las mujeres? Encontramos esta manera de pensarnos en nuestra cultura, en general, pero también en el propio conocimiento científico. Este ha sido incansablemente denunciado por presentar contenido sesgado a raíz de la aceptación, sin crítica ni reflexión, de ideas y preconceptos relativos al género arraigados en la cultura.

En epistemología se distingue entre valores constitutivos (o internos) a la ciencia y valores contextuales. Los valores constitutivos son las reglas que determinan qué es una práctica científica y cuáles son sus métodos adecuados. Los valores contextuales, en cambio, son los valores sociales, ideológicos, económicos, etc., que provienen del contexto social, cultural y político en el que se desarrolla la ciencia. Los valores contextuales operan en la propia ciencia de diversa manera, se expresan en los supuestos que conforman los sistemas culturales de creencias en los que se encuentran inmersxs lxs científicxs. En ocasiones pueden incluso llenar la distancia entre datos e hipótesis, pues subyacen en el análisis de las relaciones evidenciales (Longino, 1990 y 1997). Dentro de estos últimos cabe ubicar los valores relativos al género.

En distintas teorías médicas, biológicas, psiquiátricas resulta sencillo hallar sesgo de género. Estas teorías han afirmado, condicionadas por los valores contextuales, que las mujeres somos débiles e inferiores a los varones, que estamos destinadas por naturaleza al trabajo doméstico, que somos incapaces de pensamiento racional, que somos personas sensibles, intelectualmente defectuosas y subordinadas (Maffía, 2005). Los estudios feministas denuncian que cierto conocimiento científico es formulado sobre la base de la adopción de supuestos no-científicos y que luego se acude a ese contenido teórico para justificar las desigualdades preexistentes que le dieron origen.

Es propio de la práctica filosófica la explicitación de supuestos asumidos a la base de la adopción de ciertos marcos teóricos o teorías científicas. Es propio de la crítica feminista de la ciencia la explicitación y denuncia de estos valores cuando provienen de las desigualdades y jerarquías entre sujetxs generizadxs. Para articular la posibilidad de una filosofía feminista de la química, será necesario, por un lado, preguntarnos por el sexismo y la discriminación de las mujeres y otras identidades y orientaciones sexo-genéricas en la historia y la praxis de la disciplina y, por otro, explicitar y denunciar los valores relativos al género, los sesgos sexistas y patriarcales en el contenido teórico de las teorías químicas.

¿Es posible construir una filosofía feminista de la química? ¿Qué características debería tener esta filosofía? La crítica feminista a la ciencia, dentro de la filosofía general de la ciencia presenta un importante desarrollo teórico. En cuanto a las disciplinas científicas particulares, la biología y las ciencias de la salud (psiquiatría, endocrinología, etc.) han sido las más abordadas desde una perspectiva feminista. Se ha afirmado que, de hecho, resulta fértil buscar el sesgo de género en estas disciplinas, en tanto ellas

investigan, entre otras cosas, el dimorfismo sexual en humanos, la caracterización del sexo genético, gonadal y genital; investigan acerca de las glándulas y hormonas denominadas "sexuales"; el comportamiento diferenciado sobre la base de denominado "sexo biológico" o la denominada "diferenciación sexual del cerebro". Es en el marco de estas disciplinas que se determina cómo comprender, definir, diagnosticar y tratar ciertas enfermedades o síndromes como, por el ejemplo, los "trastornos del desarrollo sexual"[22]. Asimismo, determinadas intervenciones quirúrgicas y tratamientos hormonales –ver el Decreto del año 2015 respecto de la Ley argentina de Identidad de Género (Ley Nro. 26.743) del año 2012– suponen, en sus aplicaciones, determinado conocimiento científico producido por aquellas disciplinas (Córdoba, 2019 y 2020a). La filosofía feminista de la biología es la más desarrollada hasta el momento en el análisis del sesgo de género presente en las teorías, en la formulación de hipótesis, en la recolección de evidencia, en la construcción de modelos, etc. Y los estudios feministas sobre física y química suelen atender más bien a cuestiones históricas y prácticas, usualmente consideradas "externas" a la ciencia misma.

2. Perspectiva de género en química: Los factores "externos"

En esta sección expondré algunos aportes en el análisis filosófico de la química desde una perspectiva de género; me referiré a trabajos que reflexionan sobre aspectos prácticos de la disciplina, sobre el sexismo predominante en la práctica de la química y en la historia de la disciplina.

Staffan Bergwik (2014) analiza la carrera de Svante Arrhenius, el establecimiento de la casa familiar en el *Instituto Nobel de Química Física*, bajo su dirección en 1905, argumentado que hay una línea de continuidad entre la organización *generizada* de la sociedad burguesa europea de la época y el desarrollo de la ciencia. Analiza el rol de las *mujeres-esposas* en la constitución de una disciplina científica, el rol de la familia, el "acompañamiento" que los varones científicos requerían de parte de sus esposas y familias para pertenecer a los círculos de élite de las ciencias físicas, así como la relación existente entre la disposición de un hogar y un laboratorio modernos. Bergwik afirma que las relaciones de género hegemónicas que configuraban la estructura de la sociedad dieron

[22] "DSD" por la expresión en inglés, "Disorders of Sex Development". Esta denominación comprende los distintos tipos de intersexualidad. Se propuso en pediatría para designar desarrollos sexuales considerados atípicos.

forma al matrimonio de Arrhenius y a su estilo de vida familiar, lo que le permitió acceder a ciertas instituciones prestigiosas. Afirma, por lo tanto, que el sistema social de género resultó clave para que él se ganara su posición en la química física internacional.

Si atendemos al contexto histórico, fue durante la vida de Arrhenius que se permitió a las mujeres ingresar a la universidad y trabajar en los laboratorios de la Universidad de Estocolmo; también obtuvieron el derecho a votar. A partir de la década de 1920 podían ser contratadas como profesoras titulares en las universidades estatales. Sin embargo, describe Bergwik, era escaso el éxito profesional que alcanzaba la mayoría de las mujeres.

La primera esposa de Arrhenius, Sofia Rudbeck, con quien se había casado en 1894, era una mujer independiente, que deseaba dedicarse a su carrera; había llegado a Estocolmo en 1892 para llevar adelante su posgrado en química y mineralogía. El fracaso de la relación es atribuido, precisamente, al hecho de que ambos tenían expectativas diferentes sobre el matrimonio. Algunos amigos de Arrhenius consideraban a Rudbeck *"locamente emancipada"* (Bergwik 2014, p.273). En el año 1896 Rudbeck pidió el divorcio, lo que generó un escándalo en los círculos académicos de Estocolmo. Cuando el científico volvió a casarse, lo hizo con Maja Johansson, una mujer que no buscaba el éxito académico, lo que lo complacía enormemente.

Bergwik describe el "hogar científico" en el Instituto de Estocolmo que Arrhenius creó al casarse con su segunda esposa en 1905. Juntos, Svante y Maja Arrhenius ajustaron la vida familiar y el trabajo científico para mantener un instituto científico de prestigio. En la Suecia del Siglo XX, los hombres eran los jefes de familia y los científicos académicos, generalmente, eran hombres de familia. El trabajo que se llevaba a cabo de manera pública era masculino y el trabajo privado y reproductivo, no remunerado, era el trabajo femenino. A su vez, el trabajo de la ama de casa se consideraba fundamental en tanto complemento de la oficina del marido. El matrimonio Arrhenius desempeñaba sus funciones científicas y domésticas de forma que se reforzaban mutuamente, de acuerdo con una estructura social determinada, diferenciada y jerarquizada en función de los géneros. *"Maja y Svante confirmaron mutuamente sus capacidades y deberes. En sus interpretaciones de las competencias, ella era emocional y de apoyo, mientras que él era racional y un líder"* (Bergwik 2014, p.277). *"El conjunto que hizo posible el trabajo de Arrhenius no sólo incluía un laboratorio bien equipado en el Instituto Nobel; la creación de la vida familiar, la política de género, las ideas sobre la complementariedad*

y las actuaciones de los deberes masculinos y femeninos también formaron parte del contexto en el que vivió y alcanzó la cima de la química física europea." (Bergwik 2014, p.281).

En la misma línea, pero analizando específicamente el rol de las mujeres químicas en ocasión de la celebración del Año Internacional de la Tabla Periódica, Brigitte van Tiggelen y Annette Lykkness dedicaron un artículo a algunas de las mujeres que *"revolucionaron nuestra concepción de los elementos"* (van Tiggelen y Annette Lykkness, 2019, p.44). Allí sostienen que fueron muchas las mujeres que en la historia de la química han contribuido al descubrimiento de elementos, ampliando el conocimiento científico sobre la tabla periódica. El texto es riquísimo en datos sobre la importante cantidad de mujeres que han contribuido en este campo disciplinar y relata que en muchos casos no se han conocido sus aportes, estos han sido desestimados o sencillamente olvidados. En ocasiones sus descubrimientos o avances se han atribuido a los químicos varones que trabajaban con ellas.

Todxs conocemos a Marie Curie y sus investigaciones sobre la radiactividad, el descubrimiento del radio y el polonio, pero muchísimas otras mujeres han contribuido al desarrollo de la química y sus logros no aparecen en la historia de la disciplina. Solo por mencionar algunos casos referidos en el texto, por ejemplo, Julia Lermontova fue la primera mujer que obtuvo un doctorado en química en Alemania en el año 1874. Mendeléiev, luego de elaborar su tabla, propuso a Lermontova refinar los procesos de separación de los metales del grupo del platino (rutenio, rodio, paladio, osmio, iridio y platino), paso necesario para proceder a su ordenación. Sin embargo, el trabajo de esta química rusa no ha sido reconocido. También afirman las autoras: *"El concepto de isótopo solucionó el problema planteado por el descubrimiento de numerosos elementos para los que en apariencia no había espacio en la tabla periódica. Aunque el químico británico Frederick Soddy introdujo el concepto en 1913, fue la médica Margaret Todd quien propuso el término, que en griego significa «el mismo lugar»."* (van Tiggelen y Lykkness, 2019, p.44).

El texto recorre una interesante historia de disputas y luchas –también poco reconocidas–: *"En 1918, la física Lise Meitner y el químico Otto Hahn descubrieron en Berlín el elemento 91, el protactinio. Meitner era austríaca y, tras completar su doctorado, había buscado en Alemania una oportunidad profesional. En 1907 fue admitida como colaboradora no remunerada de Hahn en el departamento de química de la Universidad de Berlín. Tuvo que trabajar en el sótano porque las mujeres no podían acceder al edificio*

principal. En 1913, cuando Hahn se incorporó al Instituto Emperador Guillermo de Química en Berlín-Dahlem, Meitner fue nombrada «asociada» del instituto." (van Tiggelen y Lykkness, 2019, p.45). El elemento número 75, el renio, fue descubierto en 1925 por Ida Noddack y su marido, Walter Noddack. Ida Noddack trabajaba como *invitada* en el laboratorio de Walter Noddack. Señalan van Tiggelen y Lykkness que esta es una de las razones por las cuales no se consideró seriamente su idea de que el núcleo podía partirse (proceso que hoy se denomina "fisión") en 1934. Y, por ejemplo, fue un equipo de mujeres de la Universidad de Madrid el responsable del estudio de las propiedades terapéuticas y de aguas minerales en el flúor, pero al tener que abandonar la investigación a causa de la guerra civil (1936-1939), quien recibió el crédito por este trabajo fue José Casares Gil, quien trabajaba con ellas.

Estos estudios tienden a poner de relieve que es cuestionable que fueran escasas las mujeres que se destacaron en física y química. Más bien, las mujeres que alcanzaron importantes logros han sido silenciadas en los libros de texto o en las historias hegemónicas de la ciencia en todas las disciplinas. Uno de los casos más resonantes es el "olvido" de la contribución de Rosalind Franklin al descubrimiento del modelo de la doble hélice del ADN (Gonzalez García y Pérez Sedeño, 2002). En la misma línea, Eulalia Pérez Sedeño relata que cuando el derecho a la propiedad estaba vedado a las mujeres, las tecnólogas no podían figurar en registros de patentes y sus invenciones se registraban como producidas por sus maridos, padres u otros varones (Pérez Sedeño, 1998).

El caso del análisis de la contribución de las mujeres en el desarrollo de la tabla periódica enfatiza las situaciones particulares que llevaron a los varones a apropiarse de los logros de las mujeres y es elocuente respecto de denunciar el lugar siempre inferiorizado en el que investigaban.

Si bien este tipo de estudios suelen englobarse dentro de los estudios "externos" a la ciencia, respecto del caso del análisis de la carrera científica de Arrhenius en relación con la estructura de su vida familiar, Bergwik sostiene que la vida organizada de acuerdo con las relaciones de género no debe considerarse un factor "externo" a la ciencia. Las relaciones de género, por el contrario, no solo son fundamentales para crear las condiciones que hacen posible la vida científica, sino también para la propia producción de conocimiento. Es más, afirma que el "hogar científico" fue una de las condiciones de posibilidad de la producción e investigación científica, las que se vieron enormemente influenciadas por las ideas hegemónicas de la sociedad en torno al matrimonio y la

familia. Quizás la distinción entre factores y valores internos (intra-científicos) y valores contextuales (extra-científicos) no sea tan tajante o clara, o quizás exista una interrelación más asidua de la que solemos creer entre unos y otros respecto de la producción de conocimiento científico, de la elección teórica o de la interpretación de la evidencia relevante.

3. Perspectiva de género en química: La mirada sobre el contenido de las teorías

Los análisis filosóficos que evalúan el sesgo o los condicionantes de género en el contenido de las teorías químicas o en los marcos filosóficos presupuestos en ciertas teorías suelen considerarse "internos", en contraposición a aquellos que atienden más al contexto. En esta línea, analizando el contenido de ciertas teorías científicas desde una perspectiva de género, Ágnes Kovács (2012a) afirma que la descripción de los gases en termodinámica está enmarcada en una determinada concepción metafísica, la que, a su vez, se sostiene sobre la base de ciertos valores culturales. Estos análisis también ponen en cuestión la fertilidad de delimitar entre lo contextual y lo constitutivo, entre lo externo y lo interno, pues habría una influencia mutua entre uno y otro. En este sentido, los denominados valores "contextuales" funcionan como soporte del marco metafísico sin el cual no podría formularse cierto conocimiento científico, o sin el cual este no sería inteligible. Cabe señalar que este marco metafísico suele ser inadvertido por lxs propixs científicxs en su práctica.

Kovács identifica tres conjuntos de ideas o supuestos que conforman el marco metafísico sobre el cual se erige la termodinámica. Uno de estos supuestos es la distinción entre gas ideal - gas real o solución ideal - solución real y el compromiso con la *existencia* del gas o la solución ideal. De acuerdo con Kovács, esto constituye una forma de platonismo, de acuerdo con el cual las manifestaciones reales de un gas ideal son infravaloradas respecto del ideal. En segundo lugar, y en estrecha relación con esto, encontramos la idea de jerarquía perfecto - imperfecto en la cual se posicionan los estados de la materia. El gas ideal se encuentra en la posición superior de la jerarquía, los gases reales en el medio, y los líquidos en la posición inferior. La misma jerarquía es advertida en la secuencia solución ideal - solución regular. Atendiendo al contenido de la idealización, la autora se pregunta qué aspectos de los sistemas termodinámicos reales son considerados esenciales y, por tanto, son considerados parte del modelo y cuáles son

considerados secundarios en orden de importancia (Kovács 2012a). En tercer lugar, la escala perfecto - imperfecto es una función de las fuerzas intermoleculares en el sistema y de la extensión de las entidades moleculares en el espacio, su materialización. Las interacciones y la materialización son consideradas problemáticas en tanto constituyen desviaciones del estado ideal.

Kovács caracteriza brevemente el platonismo en ciencias como la visión metafísica de acuerdo con la cual los objetos, propiedades y relaciones son copias imperfectas de algunas entidades arquetípicas abstractas: las formas o ideas. En la teoría de los gases, la autora encuentra una incapacidad para lidiar con la interacción y la materialización. Los sistemas ideales son construidos libres de interacción, mientras en los sistemas reales las interacciones no pueden ser dejadas de lado. La ecuación del gas ideal es una ley limitante; los gases reales se comportan como un gas ideal a presión cero, cuando no está presente ninguna molécula de gas. La misma idea funciona en la termodinámica de las soluciones: las soluciones reales muestran un comportamiento ideal cuando la concentración del soluto se aproxima a cero, es decir, cuando ninguna molécula soluto está presente en el solvente (en cuyo caso no es una solución sino un líquido puro). "Los modelos para los gases y soluciones son, por tanto, incapaces de conceptualizar algo que es esencial en todas las instancias reales del fenómeno que se intenta describir. Algo que no es característico de todos los casos es postulado como su esencia." (Kovács 2012a, p.104). La autora se pregunta por los valores que motivan la elección de algunas propiedades como esenciales de los gases y algunas otras como contingentes, secundarias y epifenoménicas.

El modelo del gas ideal en termodinámica descansa en el modelo mecánico de la teoría cinética de los gases. Un gas se describe como un gran número de pequeñas partículas concebidas como esferas duras sin estructura interna (como bolas de billar). Las propiedades macroscópicas de los gases (volumen, temperatura y presión) son explicadas a partir del movimiento molecular, entendido en términos exclusivamente mecánicos: las interacciones son mecánicas y no refieren a fuerzas atractivas o repulsivas (interacciones no mecánicas). De acuerdo con Kovács, la termodinámica se asemeja a la teoría política liberal, puesto que el énfasis está puesto en el atomismo e individualismo y en la inmaterialidad. El individualismo de la teoría política liberal se refleja en el atomismo de la filosofía corpuscular, subyacente a la mecánica newtoniana y fundamento conceptual de la teoría cinética de los gases. El liberalismo concibe las sociedades como

conjuntos de individuos autónomos y la teoría cinética de los gases considera que un gas es un conjunto de partículas independientes. En ambos casos, las propiedades del sistema resultan de la suma de las propiedades de sus partes, y no se explican en términos de las relaciones o interacciones entre ellas. La inmaterialidad es otra característica que asemeja el modelo del gas ideal con el liberalismo político: la idea de que las moléculas (de gas) son puntos materiales sin extensión ni estructura interna. La teoría liberal considera a los individuos como sujetos racionales aislados del contexto cultural, material, histórico y social, aísla la racionalidad del contexto biológico que la hace posible. Respecto de esta teoría, se ha denunciado que presenta un sesgo sexista (Jaggar 1983) y tanto el marxismo como el feminismo la han cuestionado por otorgar un lugar no fundamental a las relaciones sociales, exaltando al individuo.

En síntesis, tanto en química como en la teoría política liberal, la entidad que detenta prioridad ontológica es la partícula o la persona individual, cuya característica esencial es la libertad, comprendida en términos de independencia de las otras partes del sistema. Esto puede analizarse tanto a partir de la explicitación de los compromisos filosóficos de las teorías, como históricamente, apelando a las ideas políticas o culturales dominantes en el contexto en el cual emergieron ambas teorías.

A su vez, la autora evalúa cómo la *heterogeneidad ontológica* y la *complejidad de las relaciones* –virtudes metafísicas feministas de acuerdo con Helen Longino (1992)– permiten crear las condiciones filosóficas para producir una teoría química feminista (2012a). La heterogeneidad ontológica es una característica de las entidades y la complejidad de las relaciones es una característica de los procesos en los que tienen lugar las entidades. Toma la idea de Longino de acuerdo con la cual la diferencia entre individuos y muestras debe ser atendida en toda teoría feminista puesto que pone en cuestión las "teorías de la inferioridad". Estas otorgan prioridad ontológica al hombre blanco de clase media, e interpretan la *diferencia* como distancia a partir del estándar, es decir, lo que no llega a ser el estándar. En química, la jerarquía que va de lo perfecto (ideal) a lo imperfecto (real) se moldea de acuerdo con aquel modo de comprender las diferencias. La heterogeneidad ontológica es, en cambio, la idea de que las diferencias constituyen *tipos distintos*, cada una de cuyas peculiaridades deben ser investigadas (en lugar de ser comprendidas como defectos respecto de un punto de referencia) (Longino 1992).

Kovács se pregunta si es posible que exista una química termodinámica feminista, y propone que la adopción de un marco filosófico que contemple la interacción y la materialización como aspectos básicos de todas las formas de materia, es un buen comienzo para responder la pregunta. Su crítica apunta a desenmascarar y comprender qué supuestos culturales e ideológicos moldean el contenido de las teorías científicas, y concluye que es posible hallar valores relacionados con el género en las teorías físicas y químicas a partir de la explicitación de los principios metafísicos que sirven como fundamentos conceptuales para las teorías y que, en otros contextos, son ideas que legitiman las inequidades sociales.

En esta misma línea, explicitando qué ideas que legitiman desigualdades e inequidades sociales se encuentran a la base de cierto conocimiento teórico, sí se ha abordado en extenso el caso de la endocrinología desde una perspectiva de género. Filósofas feministas, como Anne Fausto-Sterling (2006), han discutido el paradigma hormonal en relación con los preconceptos acerca de los géneros (Ciccia, 2017).

Las hormonas constituyen un objeto de estudio que puede ubicarse en una intersección de la química y la biología, pero en la actualidad, dada la especificidad del conocimiento científico ya no cabría incluir la reflexión filosófica sobre las hormonas sexuales dentro de lo que denominamos "filosofía de la química". Sin embargo, se afirma que las hormonas son de naturaleza química, son consideradas mensajeros químicos, que pueden poseer una estructura proteica, esteroidea o ser aminas o ácidos cíclicos, existiendo distintos tipos de hormonas que cumplen diversas funciones. Bien podría afirmarse, entonces, que el género *"se traslada a la química"* (Fausto-Sterling, 2006, p.207). Las hormonas denominadas "sexuales" (esteroides) son compuestos químicos secretados por órganos denominados "reproductores", relacionados con la reproducción y con la presencia de los *caracteres* "*sexuales*" *primarios y secundarios*. Con independencia de si la química orgánica se posiciona en un lugar inferior respecto de la química inorgánica, no debe desatenderse que mucho trabajo teórico referido a las hormonas puede ser discutido desde una postura feminista dentro de la filosofía de la química.

De acuerdo con Fausto-Sterling, si bien hoy parece complicado pensar que se pueda asignar sexo a un compuesto químico, la historia de las hormonas sexuales muestra que el género, de hecho, fue incorporado a los compuestos químicos. Señala que entre 1920 y 1940 se destilaron factores activos a partir de testículos y ovarios, se midió la actividad biológica de los compuestos extraídos y se produjeron cristales puros de

hormonas esteroides. Los bioquímicos, a su vez, describían las moléculas cristalizadas por medio de estructuras y fórmulas químicas precisas. Además, *"Cada paso de los investigadores hacia el aislamiento, la medición y la nomenclatura implicó decisiones científicas que continúan condicionando nuestras ideas sobre los cuerpos masculinos y femeninos"* (Fausto-Sterling 2006, p. 215). Y, poniendo en cuestión la distinción entre valores constitutivos y contextuales, el conocimiento sobre la química corporal no puede interpretarse con independencia de la construcción cultural respecto de las diferencias de género y sexo (Ciccia, 2017), por el contrario, estos dominios han estado siempre entramados. Muchxs investigadorxs sostienen que, a pesar de la evidencia de que las hormonas tienen efectos metabólicos que trascienden los órganos sexuales, se sigue sosteniendo la distinción entre hormonas *femeninas* y *masculinas*. Las ideas de los científicos sobre la biología hormonal son subsidiarias de preconceptos acerca de las diferencias de género, y el discurso médico sobre la sexualidad que se articula en la endocrinología suele resaltar la *jerarquización sexual* (Fausto-Sterling, 2006).

En la misma línea de cuestionar la distinción entre factores internos y externos, Jean-Paul Gaudilliére (2004) analiza críticamente la comprensión hormonal o bioquímica de los sexos y sostiene que es imposible comprender el conocimiento científico si no atendemos a ciertos compromisos y fenómenos sociales y culturales. Entre ellos, cuando analizamos el caso de las hormonas "sexuales", debe prestarse especial atención a la influencia de las compañías farmacéuticas, las que –según el autor– son responsables en buena medida de la determinación y producción de conocimiento científico. Afirma Gaudilliére que el carácter "masculino" o "femenino" de una sustancia no recoge ni describe cómo es el mundo natural, sino que está ligado a las exigencias de la industria y de los laboratorios –por ejemplo, está vinculado a la decisión de tratar la menopausia como una patología. Son los usos industriales de la vida los que influencian y en ocasiones determinan la "naturaleza" de los hechos y objetos investigados por lxs científicxs. Señala que la distinción definitiva entre hormonas masculinas y femeninas en el nivel hormonal de la distinción sexual es arbitraria. La "identidad sexual" –sostiene– es parcial y variable, pues la diferenciación sexual es un proceso gradual, un continuo en el que no hay una ruptura. Las hormonas no presentan un carácter *masculino* o *femenino*, sino un carácter *bisexual*. Ahora bien, este hallazgo no tuvo consecuencias en el paradigma hormonal, sino que fue tomado como pura *especulación teórica* con escaso valor fisiológico. De acuerdo con Gaudilliére, no se tuvo en cuenta el carácter bisexual de las hormonas debido

a que el conocimiento científico en este campo se erigió sobre la base de una concepción polar de los sexos que exalta una distinción categórica, no gradual ni procesual.

Las filosofías de las ciencias especiales podrían asumir un compromiso feminista al elucidar los conceptos relativos a los géneros sin los cuales cierto conocimiento teórico resultaría ininteligible. Para esto es necesario discutir los fundamentos teóricos de las disciplinas. ¿Hasta qué punto la filosofía de la química debe comprometerse con el análisis de contenido propio de la bioquímica, evaluando los fundamentos teóricos a la base de las clasificaciones que se realizan a partir de las características de las hormonas? Esta pregunta nos conduce a discutir acerca de los límites disciplinares y de las relaciones entre disciplinas, subdisciplinas y teorías, cuestión que también podría analizarse desde un punto de vista feminista.

4. Jerarquías en las relaciones interdisciplinarias e interteóricas. Algunos interrogantes a modo de conclusión

Se afirma que en biología es una tarea sencilla encontrar sesgo de género, pero en física y química no lo es. La cuestión de la delimitación disciplinar es, por supuesto, histórica, y no cabe encontrar los mismos límites a lo largo de toda la historia de la ciencia. A su vez, podemos hallar, en diversos momentos históricos, entidades, propiedades y procesos respecto de cuya investigación distintas disciplinas se solapan. Puede afirmarse que existen distintas maneras de aproximarse al conocimiento científico desde una crítica feminista, precisamente, a partir de las diferencias existentes entre las disciplinas. Así, afirma Kovács que, dado que las ciencias físicas no hacen afirmaciones acerca del sexo y el género, no pueden contener contenido ideológico respecto del género de manera directa, como sí pueden contenerlo las ciencias de la vida. Ella propone que *"antes de que se puedan analizar estos campos buscando contenido ideológico (de género), es necesario un marco conceptual que especifique qué cuenta como ideología de género en el contexto de una teoría acerca de la naturaleza inanimada"* (Kovács, 2012b, p.122).

¿A qué responde la mayor dificultad o la reticencia a ver los múltiples modos en los cuales los valores contextuales sobre las desigualdades basadas en el sistema de género informan el contenido y la práctica de la ciencia cuando esta versa sobre la naturaleza inanimada? Esta pregunta conduce a preguntarnos acerca de las diferencias y las relaciones entre disciplinas, las que también son jerárquicas. ¿Qué valores, internos y externos, motivan que las relaciones entre teorías y disciplinas sean concebidas de

acuerdo con una jerarquía, y qué compromisos y valores informan los modos en los cuales la filosofía de la ciencia ha abordado las relaciones interteóricas?

Las distintas posiciones dentro de la epistemología feminista concuerdan en que la empresa científica y la metodología de la ciencia son androcéntricas, como he señalado en la sección 1. El sujeto de conocimiento es concebido como masculino, y el objeto de conocimiento es feminizado. Son elocuentes las metáforas de acuerdo con las cuales la naturaleza debe ser *controlada*, *sometida* o *dominada*: *"Los ecos de la metáfora baconiana de la ciencia como "violación" de la naturaleza pueden aún oírse en nuestros días en la boca de científicos como Richard Feynman, quien, al recoger el Premio Nobel en 1965, se refería a las teorías científicas como jóvenes atractivas que han de ser 'ganadas', pero que se convierten con el tiempo en viejas matronas ya no deseables, pero dignas de respeto; o el filósofo Paul Feyerabend, que ve la naturaleza como una amante complaciente."* (González García y Pérez Sedeño, 2002, p.15). Así como la relación entre sujeto y objeto de conocimiento está moldeada a partir del acto machista y patriarcal del sometimiento de la mujer al varón, podemos preguntarnos cuánto de este modo de comprensión moldea también las propias relaciones jerárquicas entre disciplinas o entre teorías.

Estas jerarquías pueden ser estudiadas desde una perspectiva de género, pues resulta al menos llamativo que aquellas disciplinas que gozan del mayor prestigio y a las que se dedican mayoritariamente varones cis, sean las disciplinas en las que parece más difícil hallar sesgo de género. Recordemos que estas disciplinas son las que alcanzan mayor grado de formalización y para las cuales se requieren las capacidades atribuidas histórica y culturalmente a los varones (capacidad de abstracción, etc.) (Maffía, 2007). Finalmente, debe dirigirse una sospecha a la exclusión de las mujeres de las ciencias físico-químicas, ciencias típicamente masculinas y que gozan de mayor prestigio desde una perspectiva reduccionista. ¿Sería posible construir una ciencia feminista o anti-patriarcal, si seguimos teniendo una ciencia reduccionista?

No me detendré aquí en la cuestión del reduccionismo interteórico, pues no es el tema de este capítulo. Sin embargo, es uno de los tópicos más relevantes y discutidos en el campo de la filosofía de la química. Es ampliamente conocida, en filosofía de la ciencia, la tesis de acuerdo con la cual existe una disciplina científica fundamental a la que se reducirían todas las restantes. A su vez, dentro de esta disciplina básica, hay una jerarquización entre teorías y hay una teoría fundamental a la cual las restantes teorías

deberían reducirse. Subyace al programa reduccionista el compromiso con la existencia de una teoría capaz de explicar todas las demás, y capaz de dar cuenta de la totalidad de los fenómenos del universo. Esta idea determina la distinción entre ciencias "básicas" y ciencias "especiales". A las teorías "fundamentales" deberían poder reducirse todas las teorías meramente "fenomenológicas".

Desde una perspectiva que atiende a las relaciones interteóricas, se piensa la química en su rol dependiente, derivado o secundario respecto de la física. Los objetos de la química son presentados como "aparentes" en contraposición a la "realidad" por derecho propio de las entidades físicas. Podemos preguntarnos, entonces, si es que carecen de sesgo las teorías físicas, por ejemplo, porque se consideran parte del cuerpo de conocimiento de la disciplina fundamental y, por lo tanto, son las ciencias más objetivas[23]. ¿Qué prejuicios reduccionistas, realistas y jerarquizantes motivan la postulación de teorías "más fundamentales", entidades "más fundamentales" y que en ese campo encontraremos menos (o nulo) sesgo de género? ¿Existen en la naturaleza entes básicos y otros dependientes? ¿Entidades fundamentales y aparentes, reales y fenoménicas? Si bien ha sido ampliamente cuestionado el reduccionismo interteórico de la química a la física, esto no ha sido suficiente para rechazar la idea de que las entidades y propiedades químicas tienen una existencia secundaria, aparente o ilusoria respecto de las entidades y propiedades de la física fundamental. Por ejemplo, se afirma que la forma o estructura molecular es solo una *"poderosa e iluminadora metáfora"* (Woolley, 1982, p. 4) o que los orbitales químicos en sentido estricto "no existen" (Scerri, 2001). Desde esta perspectiva, la física investiga la estructura de lo real, mientras la química es una disciplina fenomenológica que se ocupa de entidades metafóricas o inexistentes. Respecto de la relación entre propiedades disposicionales y propiedades intrínsecas, resulta inevitable oler el tufillo patriarcal en la cita de David Mellor –con independencia del objetivo del texto en que aparece–: *"Las disposiciones son tan vergonzosas a muchos ojos como solían ser vergonzosas las mujeres solteras embarazadas. En esos casos lo ideal era encontrar una explicación que resolviera la pregunta o darles respetabilidad a través de una boda exprés para que puedan adoptar el nombre de una propiedad categórica realmente decente."* (Mellor, 1974, p.157, traducción propia).

---

[23] El programa reduccionista ha penetrado todas las relaciones entre disciplinas, pero también entre subdisciplinas. Es muy interesante señalar que, si bien es más sencillo encontrar sesgo de género dentro de la biología, se suele considerar más difícil hallarlo en biología molecular.

Estas infelices comparaciones ponen de relieve el lugar feminizado de los polos inferiores en cualquier jerarquía ontológica, y la jerarquía entre aquello de que se ocupan las disciplinas científicas no es una excepción.

Así como podemos preguntarnos si es posible una ciencia no patriarcal si mantenemos las jerarquías entre disciplinas y teorías, también podemos preguntarnos si es posible una ciencia que se libere de la opresión patriarcal si no se libera también de la opresión racial, de la opresión capitalista, etc. ¿Pueden separarse los distintos tipos de opresión? ¿Puede separarse la opresión machista de la opresión capitalista?[24] ¿Es posible producir ciencia feminista, una ciencia atravesada por valores que defiendan la igualdad entre varones y todas las personas que no son varones? ¿Es posible producir ciencia que combata la discriminación sobre la base de las identidades de género y las orientaciones sexuales, una ciencia que combata las justificaciones teóricas supuestamente científicas de esa discriminación? (Córdoba, 2020b). ¿Tiene algo que aportar la química en esta construcción? Muchos interrogantes más se han formulado en el campo de la filosofía feminista de la ciencia y muchos de ellos pueden trasladarse al campo de una naciente filosofía feminista de la química, que deberá adaptarse a la especificidad disciplinar, la que seguramente también aportará nuevas inquietudes.

Referencias bibliográficas

Anderson, E. (2019). "Feminist Epistemology and Philosophy of Science", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Summer 2019 Edition), Edward N. Zalta (ed.), URL =<https://plato.stanford.edu/archives/sum2019/entries/feminism-epistemology/>

Bach, Ana M. (2010). “Un giro de 180 grados: experiencia y conocimiento” en *Las voces de la experiencia*, Biblos: Buenos Aires, pp.63-104.

Bergwik, S. (2014). “An Assemblage of Science and Home: The Gendered Lifestyle of Svante Arrhenius and Early Twentieth-Century Physical Chemistry”. *Isis*, 105: 265-291.

Blazquez Graf, N. (2008). “Epistemología Feminista: Temas Centrales”, En: Blazquez Graf, N. (ed.), *El Retorno de las Brujas. Incorporación, Aportaciones y Críticas de las Mujeres a la Ciencia*, CDMX, CEICH-UNAM.

Ciccia, L. (2017). *La ficción de los sexos: Hacia un pensamiento Neuroqueer desde la epistemología feminista*. [Tesis doctoral, Universidad de Buenos Aires]. Repositorio UBA. URL = http://repositorio.filo.uba.ar/handle/filodigital/4638

Córdoba, M. (2019). “Making genders: The biotechnological and legal management of identity”, En: Loh, J. y Coeckelbergh, M. (eds.). *Feminist Philosophy of Technology*, Springer-Metzler, pp.225-243.

Córdoba, M. (2020a). “Identidades que importan. Trans e intersex, la ley argentina y la irrupción de la ciencia”. *Revista Dianoia*, 65: 31-58.

Córdoba, M. (2020b). “Visiones feministas sobre las ciencias y análisis de una ‘anomalía’”, En: Paruelo, J. (comp.), *IPC Paruelo*, CCC Editorial Educando: Buenos Aires, pp.169-180.

Fausto-Sterling, A. (2006). *Cuerpos sexuados. La política de género y la construcción de la sexualidad*, Melusina: Barcelona.

[24] Los feminismos actuales proponen una militancia interseccional, de acuerdo con la cual los diversos tipos de opresión no pueden ser atacados por separado (Segato, 2018).

Gaudillière, J-P. (2004). “Genesis and Development of a Biomedical Object: Styles of Thought, Styles of Work and the History of the Sex Steroids”. *Studies in History and Philosophy of Biological and Medical Sciences*, 35: 525-543.
González García, M. y Pérez Sedeño, E. (2002). “Ciencia, Tecnología y Género”. *Revista Iberoamericana de Ciencia, Tecnología, Sociedad e Innovación* 2.
Haraway, D. J. (1995). *Ciencia, cyborgs y mujeres. La reinvención de la Naturaleza*. Cátedra: Madrid.
Harding, S. (1986). *The Science Question in Feminism*. Cornell University Press: London-Ithaca.
Harding, S. (1991). *Whose Science? Whose Knowledge*. Cornell University Press: London-Ithaca.
Jaggar, A. (1983). *Feminist Politics and Human Nature*, Rowman & Allanheld: Totowa.
Kovács, A. (2012a). “Gender in the Substance of Chemistry, Part 1: The Ideal Gas”. *HYLE*, 18: 95-120.
Kovács, A. (2012b). “Gender in the Substance of Chemistry, Part 2: An Agenda for Theory”. *HYLE*, 18: 121-143.
Longino, H. (1990). *Science as Social Knowledge: Values and Objectivity in Scientific Inquiry*. Princeton University Press: Princeton.
Longino, H. (1992). “Taking Gender Seriously in Philosophy of Science”. *PSA* (2): 333-40.
Longino, H. (1997). “Feminist Epistemology as a Local Epistemology – I.’, *Proceedings of the Aristotelian Society*, *Supplementary Volumes*, 71: 19-35.
Longino, H. (2016). The Social Dimensions of Scientific Knowledge. *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2016 Edition), Edward N. Zalta (ed.). URL = <https://plato.stanford.edu/archives/spr2016/entries/scientific-knowledge-social/>.
Maffía, D. (2005). “Conocimiento y emoción”. *Arbor*, 716: 516-521.
Maffía, D. (2007). “Epistemología feminista. La subversión de las mujeres en la ciencia”. *Revista Venezolana de Estudios de la Mujer*, 12: 63-98.
Maffía, D. y Cabral, M. (2003). “Los sexos ¿son o se hacen?”, En: Maffia, D. (comp.), *Sexualidades migrantes. Género y transgénero*, Feminaria: Buenos Aires, pp.86-96.
Mc Manus, S. F. (2020). “Género, Saber y Justicia. Las promesas y peligros de las ciencias y las tecnologías miradas desde el feminismo”. *Revista Murmullos Filosóficos*: 6-12.
Mellor, D. H. (1974). “In defense of dispositions”. *Philosophical Review*, 83: 157-181.
Pérez Sedeño, E. (1995). “Filosofía de la ciencia y feminismo: intersección y convergencia”. *Isegoría*, 12: 160-171.
Pérez Sedeño, E. (1998). “Factores contextuales, tecnología y valores: ¿desde la periferia?”. *Contrastes. Revista interdisciplinar de filosofía*, 3: 119-142.
Rubin, G. (1975). “The traffic in women: notes on the political economy of sex”. En: Reiter, R. (ed.). *Toward and Anthropology of Women*. Monthly Review Press: New York, pp.l57-210.
Schiebinger, L. (2004). *¿Tiene sexo la mente?.* Cátedra-Feminismos: Madrid.
Segato, R. (2018). *La guerra contra las mujeres*. Prometeo: Buenos Aires.
Scerri, E. (2001). “The recently claimed observation of atomic orbitals and some related philosophical issues”, *Philosophy of Science*, 68: S76-S88.
van Tiggelen, B. y A. Lykkness (2019). “Las mujeres de la tabla periódica. Un homenaje a las investigadoras que contribuyeron al descubrimiento de los elementos químicos y sus propiedades”. *Investigación y Ciencia*: 44-46.
Woolley, R. (1982), “Natural optic activity and the molecular hypothesis”. *Structure and Bonding* 52: 1-35.